

Uso de MIR e Análise Discriminante por Quadrados Mínimos Parciais para classificação de biodieseis de soja e pinhão-mansão

Sarmento Junior Mazivila¹ (PG), Hery Mitsutake¹ (PG), Felipe Bachion de Santana¹ (PG), Douglas Queiroz Santos² (PQ), *Waldomiro Borges Neto¹ (PQ) *wbn@iqufu.ufu.br

¹ Laboratório de Quimiometria do Triângulo, Instituto de Química, Universidade Federal de Uberlândia.

² Escola Técnica de Saúde (ESTES), Universidade Federal Uberlândia.

Palavras Chave: PLS-DA, MIR, biodiesel, soja, pinhão-mansão

Introdução

Atualmente, o biodiesel pode ser produzido de várias matérias-primas (MP), cuja escolha depende das limitações geográficas e valores de mercado. Como consequência, o produto final pode apresentar diferentes propriedades, o que torna o controle de qualidade em relação a MP deste combustível muito importante.¹ O pinhão manso mostra-se uma MP promissora para a produção de biodiesel, devido a qualidade do óleo extraído.² Portanto, este trabalho teve por objetivo desenvolver uma metodologia para a discriminação de biodiesel puro (B100) de etílico de pinhão manso (BEP) em relação a: (i) etílico de soja (BES), (ii) metílico de pinhão manso (BMP) utilizando a espectroscopia no infravermelho médio (MIR) e Análise Discriminante por Quadrados Mínimos Parciais (PLS-DA).

Para isto, preparou-se 22 amostras de cada tipo de biodiesel. Os espectros foram obtidos utilizando o equipamento SpectrumTwo (Perkin Elmer), com acessório amostrador ATR de ZnSe, na faixa de 4000 cm⁻¹ a 600 cm⁻¹, resolução de 4 cm⁻¹, 16 varreduras e em quintuplicata. Os espectros foram corrigidos pelo método de *baseline*. O programa utilizado foi o MATLAB 7.5 e PLS_Toolbox 7.5.

Resultados e Discussão

O modelo foi construído com 2 variáveis latentes, com RMSEC de 0,0656, RMSECV de 0,0722 e RMSEP de 0,0743. As amostras foram divididas em conjuntos de calibração (15 amostras de cada tipo de biodiesel) e de validação (7 amostras para cada tipo de biodiesel). A Figura 1 mostra o gráfico de probabilidade das amostras pertencerem à classe de BEP. A partir deste gráfico, pode-se verificar que houve uma classificação 100% correta, indicando a boa habilidade de classificação do modelo construído. A Tabela 1 apresenta os valores para falso positivo e falso negativo, sensibilidade e especificidade.

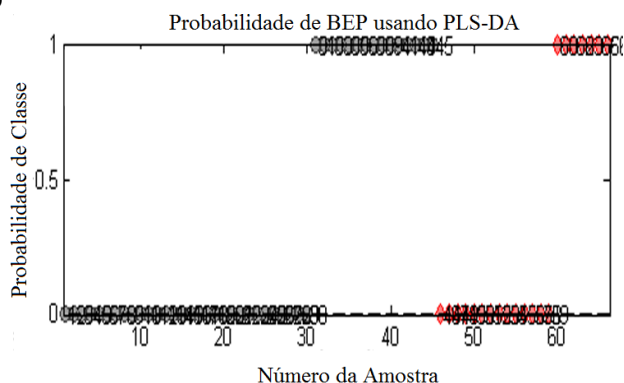


Figura 1. Gráfico de probabilidade para a classe BEP; (●) amostras de calibração e (♦) amostras de validação.

Tabela 1. Resultados de erros e da validação do modelo PLS-DA.

Parâmetro	BER	BMS	BMR
Falso positivo	0,00	0,00	0,00
Falso negativo	0,00	0,00	0,00
Sensibilidade	1,00	1,00	1,00
Especificidade	1,00	1,00	1,00

A partir dos resultados obtidos, verificou-se que a metodologia desenvolvida apresenta grande eficiência na classificação do biodiesel em relação a sua matéria-prima.

Conclusões

A metodologia desenvolvida neste trabalho, que alia a espectroscopia no MIR com PLS-DA, mostrou-se eficiente na classificação de biodieseis em relação a sua matéria-prima, podendo ser utilizada no controle de qualidade deste combustível.

Agradecimentos

FAPEMIG (Projeto 17.014/11), CAPES, CNPq

¹ Baptista, P.; Felizardo, P.; Menezes, J. C.; Correia, M. J. N. *Talanta*, **2008**, *77*, 144.

² Choudhury, H. A.; Goswami, P. P.; Malani, R. S.; Moholkar, V. S. *Ultrasonics Sonochemistry*, **2014**, *21*, 1050.