

UNIVERSIDADE FEDERAL DO MARANHÃO
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE ELETRICIDADE
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE ELETRICIDADE

ALEX OLIVEIRA BARRADAS FILHO

**AVALIAÇÃO DE MATÉRIAS-PRIMAS PARA QUALIDADE DE BODIESEIS PELA
PREDIÇÃO DE PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS**

São Luís

2015

ALEX OLIVEIRA BARRADAS FILHO

**AVALIAÇÃO DE MATÉRIAS-PRIMAS PARA QUALIDADE DE BIODIESEIS PELA
PREDIÇÃO DE PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS**

Tese de Doutorado apresentada ao curso de Pós-Graduação em Engenharia de Eletricidade da Universidade Federal do Maranhão para a obtenção do título de Doutor em Engenharia de Eletricidade, na área de concentração Ciência da Computação

Orientador: Allan Kardec Duailibe Barros Filho

Coorientador: Sofiane Labidi

São Luís

2015

Barradas Filho, Alex Oliveira.

Avaliação de matérias-primas para qualidade de biodieseis pela predição de propriedades físico-químicas/ Alex Oliveira Barradas Filho. – São Luís, 2015.

100 f.

Impresso por computador (fotocópia).

Orientador: Allan Kardec Duailibe Barros Filho.

Coorientador: Sofiane Labidi.

Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Maranhão, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Eletricidade, 2015.

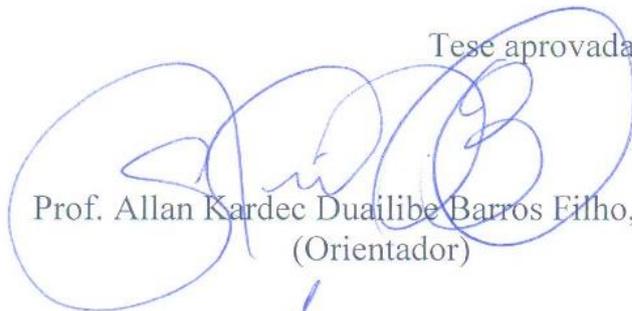
1. Parâmetros de qualidade de biodiesel. 2. Redes neurais artificiais. 3. Predição de propriedades. 4. Matrizes vegetais. I. Título.

CDU 662.756.3

**AVALIAÇÃO DE MATÉRIAS-PRIMAS PARA QUALIDADE
DE BIODIESEIS PELA PREDIÇÃO DE PROPRIEDADES
FÍSICO-QUÍMICAS**

Alex Oliveira Barradas Filho

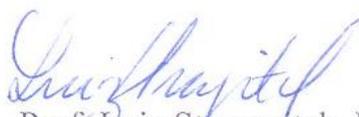
Tese aprovada em 30 de janeiro de 2015.



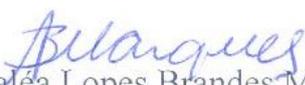
Prof. Allan Kardec Duailibe Barros Filho, Ph.D.
(Orientador)



Prof. Heronides Adonias Dantas Filho, Dr.
(Membro da Banca Examinadora)



Prof. Luiz Stragevitch, Dr.
(Membro da Banca Examinadora)



Prof. Aldaléa Lopes Brandes Marques, Dra.
(Membro da Banca Examinadora)



Prof. Sofiane Labidi, Dr.
(Membro da Banca Examinadora)



Prof. Zair Abdelouahab, Dr.
(Membro da Banca Examinadora)

Aos meus queridos pais, Alequissander
Oliveira Barradas e Maria da Graça Caldeira
Salgado Barradas.

AGRADECIMENTOS

Agradeço, em primeiro lugar, a Deus por conceder tudo que necessito em minhas caminhadas. Uma vez dito e demonstrado o meu reconhecimento ao pai de todos, eu gostaria de ceder, posteriormente, as maiores homenagens e agradecimento para os meus avôs. O primeiro, Joaquim Alexandre Barradas (*in memoriam*), um odontólogo de respeito e prestígio que manteve a educação ao alcance de sua família, o qual infelizmente não pude conhecer, mas aprendi a admirá-lo apenas observando e aprendendo com o seu filho. Para a minha querida avó e madrinha, Florisa de Oliveira Barradas (*in memoriam*), uma mulher disciplinadora, forte e protetora, sempre me trouxe uma bagagem cultural de suas viagens ao mundo e os incentivos necessários para minhas ideias. Ao meu padrinho e avô, Natalino Salgado, um mensageiro da literatura e da oratória, os meus modestos agradecimentos por compartilhar suas experiências e contos da vida. Por último e não menos importante, à minha avó linda de aparência e espírito, Ivete Caldeira Salgado (*in memoriam*), uma mulher dedicada a Deus e à família, muito obrigado por estar presente e cuidar de mim sempre que precisei.

Aos meus pais (Alequissander e Maria da Graça) e família por representarem tudo em minha vida.

Ao meu orientador, Allan Kardec Duailibe Barros, pela oportunidade concedida, confiança depositada e orientação oferecida.

Aos professores Sofiane Labidi e Aldaléa Lopes Brandes Marques por acompanharem de perto a minha evolução acadêmica com paciência, dedicação e carinho.

Aos valiosos amigos, Adriano dos Santos Rêgo e Isabelle Moraes Amorim Viegas, pela ajuda e parceria oferecida durante o doutorado, além do incentivo e conquistas realizadas neste período.

Aos professores, funcionários e alunos dos laboratórios LSI, LPQA, PIB e LAPQAP, por terem me acolhido e propiciado gratificantes momentos de descontração como de troca de conhecimentos.

Ao professor Heronides Adonias Dantas Filho por ter me recebido na UFPA e colaborado na pesquisa.

A todos os meus parentes e amigos pelo carinho, apoio e torcida.

A ANP/PRH39 e FINEPE pelo financiamento de minha pesquisa.

A todos aqueles que diretamente ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho.

“O motor diesel pode ser alimentado com óleos vegetais e poderá ajudar consideravelmente o desenvolvimento da agricultura nos países onde ele funcionar. Isso parece um sonho do futuro, mas eu posso predizer com inteira convicção que esse modo de emprego do motor diesel pode, em dado tempo, adquirir uma grande importância.”

Rudolf Diesel, 1911

RESUMO

Na busca por combustíveis alternativos que possam substituir gradualmente os derivados de petróleo, o biodiesel é apontado como um substituto para o diesel mineral e é definido como um biocombustível obtido a partir da transesterificação de triglicerídeos. O presente trabalho tem como objetivo a otimização e aplicação de redes neurais artificiais (ANNs) na predição de viscosidade, índice de iodo, período de indução, número de cetano, massa específica e ponto de entupimento de filtro a frio (PEFF) de biodiesel, propriedades inerentes à composição. As variáveis de entrada foram os percentuais de 13 ésteres metílicos de ácidos graxos (FAMES) mais comuns em biodieseis e, como a transesterificação não altera o perfil de ésteres de ácidos graxos da matéria-prima, o método ANN permitiu a predição das seis propriedades, seja antes da transesterificação, após a síntese de biodiesel ou durante o armazenamento. Portanto, este método pode ser útil como uma ferramenta para avaliar o potencial de matérias-primas para produzir um biodiesel com boa qualidade e para alcançar melhorias relativas aos métodos oficiais. O processo de otimização da ANN ocorreu em três etapas: teste dos algoritmos para ajuste de pesos, teste das condições de parada e teste das funções de ativação, e as propriedades físico-químicas foram tratadas de forma independentes. Para o conjunto de amostras de teste, que simula as amostras reais, a aplicação das ANN otimizadas forneceu resultados com a raiz do erro médio quadrático (RMSE) de 0,55 mm²/s, 3,49 g/100g, 0,89 h, 2,06, 2,89 kg/m³ e 2,61 °C para viscosidade, índice de iodo, período de indução, número de cetano, massa específica e PEFF, respectivamente, o que assegura a viabilidade do método proposto. Uma comparação entre o método proposto e métodos lineares, ambos com base na composição de biodiesel, indica que o modelo de ANN é mais adequado para o problema abordado.

Palavras-chave: Redes neurais artificiais. Parâmetros de qualidade de biodiesel. Predição de propriedades. Matrizes vegetais.

ABSTRACT

Alternative fuels have the potential to replace gradually the petroleum derivatives, and the biodiesel, that is a biofuel obtained from transesterification of triglycerides, is pointed as a substitute for mineral diesel. The present work focus on the optimization and application of artificial neural networks (ANNs) on the prediction of viscosity, iodine value, induction period, cetane number, specific gravity and cold filter plugging point of biodiesel, which are properties inherent to the composition. The input variables were the percentage of 13 fatty acid methyl esters (FAMEs) more common in biodiesels and, once the transesterification does not modify the fatty esters profile of the raw materials, the ANN method allowed the prediction of the six properties, even before the transesterification, after synthesis of the biodiesel or during the storage. Therefore, this method can be useful as a tool to evaluate the potential of raw materials to produce a biodiesel with good quality and to reach improvements on official methods. The optimization process of ANN occurred in three steps: test of algorithms for adjusting weights, test of stopping condition and test of activation functions, and the physicochemical properties were treated independently. For the set of test samples, which simulates real samples, the application of the optimized ANNs provided results with root mean squared errors (RMSE) of 0.55 mm²/s, 3.49 g/100g, 0.89 h, 2.06, 2.89 kg/m³ and 2.61 °C for viscosity, iodine value, induction period, cetane number, specific gravity and cold filter plugging point, respectively, what ensures the feasibility of the proposed method. A comparison between the proposed method and linear methods from literature, both based on the biodiesel composition indicate that our ANN model is much more adequate to the problem addressed.

Keywords: Artificial neural networks. Quality parameters of biodiesel. Properties prediction. Vegetable raw materials.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Percentual em volume das matérias-primas utilizadas na produção de biodiesel (B100) no Brasil, em 2013	18
Figura 2 - Reação de transesterificação	19
Figura 3 - Distribuição da produção de soja, milho, algodão, babaçu e tucum no Estado do Maranhão	26
Figura 4 - Modelo de rede neural MLP	30
Figura 5 - Estrutura geral dos sistemas Oleodata e ProOleo	38
Figura 6 - Diagrama de caso de uso do Oleodata - óleo.....	38
Figura 7 - Diagrama de caso de uso do Oleodata - biodiesel	39
Figura 8 - Caso de uso do ProOleo.....	40
Figura 9 - Distribuição de frequência dos ésteres	41
Figura 10 - Gráfico de dispersão dos valores preditos (output) x valores reais (target), R, RMSE e MAPE para o conjunto de amostras de treinamento, validação e teste para as propriedades índice de iodo e viscosidade	53
Figura 11 - Gráfico de dispersão dos valores preditos (output) x valores reais (target), R, RMSE e MAPE para o conjunto de amostras de treinamento, validação e teste para as propriedades período de indução e PEFF.....	54
Figura 12 - Gráfico de dispersão dos valores preditos (output) x valores reais (target), R, RMSE e MAPE para o conjunto de amostras de treinamento, validação e teste para as propriedades massa específica e número de cetano	55
Figura 13 - Valores preditos e valores reais da viscosidade em amostras testes de biodiesel.	56
Figura 14 - Valores preditos e valores reais do índice de iodo em amostras testes de biodiesel.	57
Figura 15 - Valores preditos e valores reais do período de indução em amostras testes de biodiesel.....	57
Figura 16 - Valores preditos e valores reais do número de cetano em amostras testes de biodiesel.....	58
Figura 17 - Valores preditos e valores reais da massa específica em amostras testes de biodiesel.	59
Figura 18 - Valores preditos e valores reais do PEFF em amostras testes de biodiesel.....	60
Figura 19 - Comparação dos RMSEs para o método de ANN e equações de MLR desenvolvidos e métodos lineares da literatura, aplicados nas amostras do conjunto de teste para	

predição das propriedades viscosidade, índice de iodo, período de indução, número de cetano,
massa específica e PEFF..... 61

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Composição de óleos vegetais de diferentes fontes	20
Tabela 2 - Padrões de qualidade para biodiesel de diferentes países	21
Tabela 3 - Quantidades de soja, milho, algodão herbáceo, babaçu, tucum, dendê e pinhão manso produzidas pelo Brasil e pelo Maranhão em 2011 e participações do Maranhão no total da produção nacional	25
Tabela 4 - Características dos óleos vegetais das espécies em estudo	28
Tabela 5 - Classificação de ANNs por tipos de aprendizado	31
Tabela 6 - Publicações envolvendo aplicações de ANNs em combustíveis, dispostas por algoritmos	33
Tabela 7 - Métodos de predição aplicados à predição das propriedades do biodiesel e óleos	34
Tabela 8 - Métodos e equipamentos utilizados para as análises dos biodieseis	42
Tabela 9 - Informações sobre os dados das amostras de biodiesel e especificações dos parâmetros de qualidade estudados	43
Tabela 10 - Especificações dos parâmetros para otimização das ANNs	44
Tabela 11 - Modelos lineares para predição das propriedades de viscosidade, índice de iodo, período de indução, número de cetano, massa específica e ponto de entupimento de filtro a frio	45
Tabela 12 - Resumo dos resultados obtidos no processo de otimização do método ANN	52

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

Pró-óleo	Plano de Produção de Óleos Vegetais para Fins Energéticos
PNPB	Programa Nacional de Produção e Uso do Biodiesel
PEFF	Ponto de Entupimento de Filtro a Frio
ANP	Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis
RANP 45/2014	Resolução da ANP nº 45 de 2014
ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
ASTM	<i>American Society for Testing and Materials</i>
ISO	<i>International Organization for Standardization</i>
CEN	<i>Comité Européen de Normalisation</i>
LPQA	Laboratório de Pesquisa em Química Analítica
UFMA	Universidade Federal do Maranhão
LAPQAP	Laboratório de Análises e Pesquisa em Química Analítica de Petróleo e Biocombustíveis
IBGE	Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística
ANN	Redes Neurais Artificiais
AI	Inteligência Artificial
MLP	<i>Multi-Layer Perceptron</i>
PCA	Análise por Componentes Principais
1H NMR	Ressonância Magnética Nuclear de Próton
MLR	Regressão Linear Múltipla
PCR	Regressão por Componentes Principais
PLS	Regressão por Mínimos Quadrados Parciais
NIR	Espectroscopia de Infravermelho Próximo
SVM	Máquinas de Vetores-Suporte
Apps	Aplicativo
XML	<i>eXtensible Markup Language</i>
HTTP	Protocolo de Transferência de Hipertexto
SOAP	Protocolo Simples de Acesso a Objetos
PHP	<i>Hypertext Preprocessor</i>
SGBD	Sistema Gerenciador de Banco de Dados

FAME	Éster Metílico de Ácido Graxo
C8:0	Ácido caprílico
C10:0	Ácido cáprico
C12:0	Ácido láurico
C14:0	Ácido mirístico
C16:0	Ácido palmítico
C18:0	Ácido esteárico
C18:1	Ácido oleico
C18:2	Ácido linoleico
C18:3	Ácido linolênico
C20:0	Ácido araquídico
C20:1	Ácido gadoleico
C22:1	Ácido erúcico
C18:1 OH	Ácido ricinoleico
Tanh	Função Tangente Hiperbólica
Logsig	Função Logística
BFGS	Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno
LM	Levenberg–Marquardt
MSE	Erro Quadrático Médio
MAPE	Erro Médio Percentual Absoluto
RMSE	Raiz do Erro Médio Quadrático

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	15
1.2 Objetivos Específicos	16
1.3 Contribuição do Presente Estudo	17
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	18
2.1 Aspectos Técnicos, Propriedades e Qualidade do Biodiesel	19
2.2 Panorama de Oleaginosas para a Produção de Biodiesel no Maranhão	24
2.3 Redes Neurais Artificiais e Aplicações	29
2.4 Trabalhos Relacionados	33
3 METODOLOGIA	37
3.1 Sistema Proposto para Predição de Propriedades de Biodiesel relacionadas à Composição	37
3.2 Preparo das Amostras e Dados utilizados	41
3.3 Aplicação de Redes Neurais	43
3.4 Modelos lineares	44
4 RESULTADOS	50
5 CONCLUSÕES	65
REFERÊNCIAS	66
APÊNDICES	76

1 INTRODUÇÃO

Nos últimos anos, a viabilidade de novas fontes energéticas tem sido fortemente debatida e estudada por diversos centros de pesquisas espalhados pelo mundo, a fim de buscar combustíveis alternativos que substituam gradativamente os derivados de petróleo. Tal comedito é motivado pelo declínio dos recursos petrolíferos, pela estimativa de aumento do consumo energético nos próximos anos e pela busca por segurança energética e ambiental.

Essas medidas têm motivado a proliferação de ferramentas e técnicas para o monitoramento e controle da qualidade de biocombustíveis. O biodiesel é um exemplo do emprego de biomassa para a produção de energia. Como subproduto, obtêm-se glicerol livre e, em menor quantidade, sabões residuais e resíduos de catalisador e álcool [1]

O uso do biodiesel, como combustível alternativo ao diesel mineral, pode proporcionar algumas vantagens, como a redução das emissões de gases que contribuem para o aquecimento global, maior viscosidade e, conseqüentemente, maior lubrificidade, além de possuir baixo risco de explosão e rendimento similar ao diesel quando referente à potência e ao torque [2]. Ademais, o biodiesel pode ser adicionado em até 20% de volume ao diesel sem a necessidade de modificações no motor [3].

No Brasil, a diversidade e a abundância de matérias-primas utilizadas para a produção de biodiesel, o clima tropical e a extensa área geográfica contribuem para que o biodiesel seja uma fonte promissora de energia renovável no país [4] [5]. A trajetória do biodiesel no Brasil se iniciou com estudos sobre combustíveis alternativos e renováveis realizados pelo Instituto Nacional de Tecnologia, na década de 20 do século XX [6] e ganhou destaque em meados de 1970, com a criação do Plano de Produção de Óleos Vegetais para Fins Energéticos (Pró-óleo) [7].

Na década de 1980, o Governo Federal lançou o Pró-óleo, pela Resolução nº 7 do Conselho Nacional de Energia. A partir de 1986, os preços do petróleo despencaram, diminuindo a pressão para economizar energia e aumentar a produtividade energética nacional. O resultado foi a redução de incentivos governamentais às atividades de produção experimental de óleo diesel de origem vegetal [7].

No ano de 2003, iniciaram-se os estudos para a solidificação de uma política de biodiesel no Brasil e, em 2004, foi criado o Programa Nacional de Produção e Uso do Biodiesel (PNPB). Em 2005, o Congresso Nacional aprovou a lei nº 11.097/05 que dispõe sobre a introdução do biodiesel na matriz energética brasileira, onde determina percentuais mínimos de mistura de biodiesel ao diesel e o monitoramento da inserção do novo combustível no mercado [7].

De forma geral, o Governo Federal retomou e fortaleceu as políticas públicas tanto na pesquisa como na produção de energias renováveis. O resultado foi o aumento no consumo de biodiesel no país e a proliferação de pesquisas, trabalhos publicados e patentes desenvolvidas na área.

Alguns dos problemas abordados em diversos tipos de estudos visam garantir a qualidade do biodiesel, diminuir o elevado custo na aquisição e manutenção dos equipamentos para a determinação das propriedades físico-químicas do biodiesel e acelerar a aquisição dos resultados das análises de propriedades físico-químicas, pois os atuais métodos consomem um alto tempo para a conclusão do processo.

A análise do potencial de uma oleaginosa para produção de biodiesel, antes da realização do processo de transesterificação, se torna uma alternativa interessante pois evita toda a etapa dispendiosa da fabricação de biodiesel e das análises de suas propriedades para a avaliação de uma determinada oleaginosa, além de contribuir para assegurar a qualidade do biodiesel.

Uma vez que a transesterificação não altera o perfil de ésteres de ácidos graxos da matéria-prima [8] [9], a aplicação de redes neurais permite a predição das propriedades físico-químicas que estejam diretamente relacionadas a composição da matriz, seja antes da transesterificação (a partir da composição do óleo ou gordura), após a síntese do biodiesel ou durante o armazenamento. Isso possibilita o monitoramento dessas propriedades a qualquer momento desde a escolha da matéria-prima até a distribuição ou consumo do biocombustível.

Desse modo, se torna extremamente relevante a estimativa dos parâmetros de qualidade do biodiesel, antes mesmo da transesterificação, para avaliar o potencial de matrizes vegetais para produzir um biodiesel e inclusive atingir melhorias em relação aos métodos oficiais.

1.1 Objetivo Geral

Avaliar oleaginosas para a produção de biodiesel pela predição de propriedades físico-químicas a partir de ésteres inerentes (ou relacionados) às estruturas moleculares.

1.2 Objetivos Específicos

- Preparar um banco de dados a partir da composição de biodiesel e das propriedades físico-químicas relacionadas à composição;
- Desenvolver mecanismos para estruturar, construir, ampliar e compartilhar uma base de dados de óleos e biodieseis;

- Prover um método eficiente e de baixo custo para a predição de propriedades físico-químicas, por meio da proposição e aplicação de redes neurais artificiais;
- Comparar os resultados de predição obtidos com métodos disponíveis na literatura.

1.3 Contribuição do Presente Estudo

Os resultados obtidos no presente trabalho proporcionam um método eficiente e de baixo custo para predição de propriedades físico-químicas de biodiesel relacionadas à composição do óleo, visto que os percentuais de ésteres permanecem praticamente inalterados mesmo após a transesterificação. Desse modo, a avaliação do potencial de um determinado óleo para a produção de biodiesel se torna viável, bem como a análise dos parâmetros de qualidade do biodiesel estudados: índice de iodo, massa específica, número de cetano, viscosidade cinemática, período de indução e ponto de entupimento de filtro a frio (PEFF).

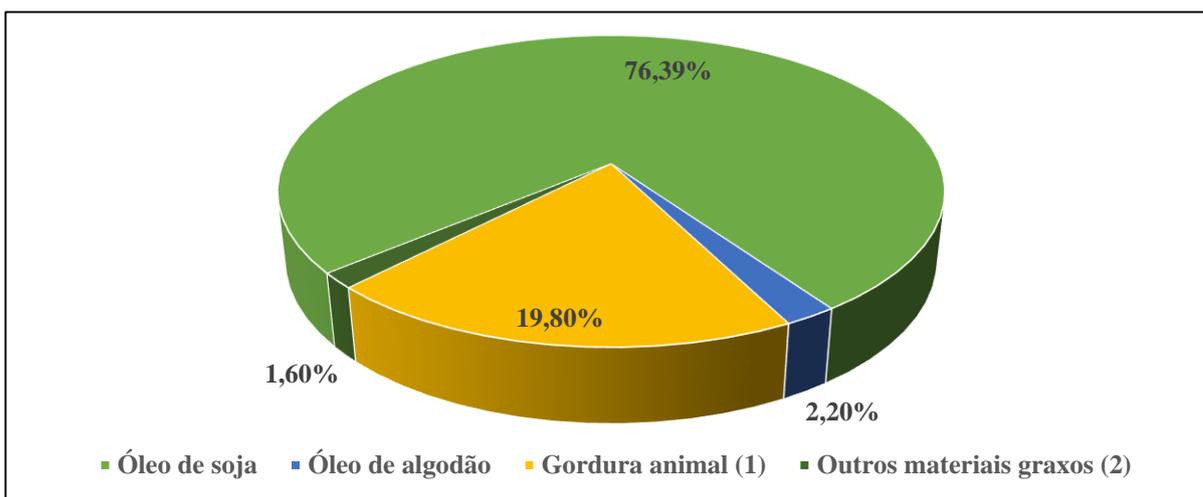
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP), por meio da Resolução nº 45 de 2014 (RANP 45/2014), define biodiesel como um combustível composto de alquil ésteres de ácidos carboxílicos de cadeia longa, produzido a partir da transesterificação e/ou esterificação de matérias graxas, de gorduras de origem vegetal ou animal, com um álcool de cadeia curta [10], como metanol ou etanol.

Para a produção de biodiesel, mais de 300 matérias-primas têm sido utilizadas, incluindo óleos comestíveis e não comestíveis, óleos brutos, óleos usados em frituras e gorduras animais [11]. Dentre as principais matérias-primas, destacam-se os óleos de soja, palma, algodão, colza, pinhão-manso, girassol e o sebo bovino, porém todos os óleos vegetais, enquadrados na categoria de óleos fixos ou triglicerídeos, e gorduras animais podem ser usados [1].

Segundo dados da ANP, em 2013 a principal matéria-prima do biodiesel, no Brasil, foi o óleo de soja, com 76,39% do total, e a rota metílica foi a mais utilizada [12]. Os percentuais de cada matéria-prima, em volume dos 2,9 milhões m³ de biodiesel produzidos no Brasil, estão representados no gráfico da Figura 1.

Figura 1 - Percentual em volume das matérias-primas utilizadas na produção de biodiesel (B100) no Brasil, em 2013



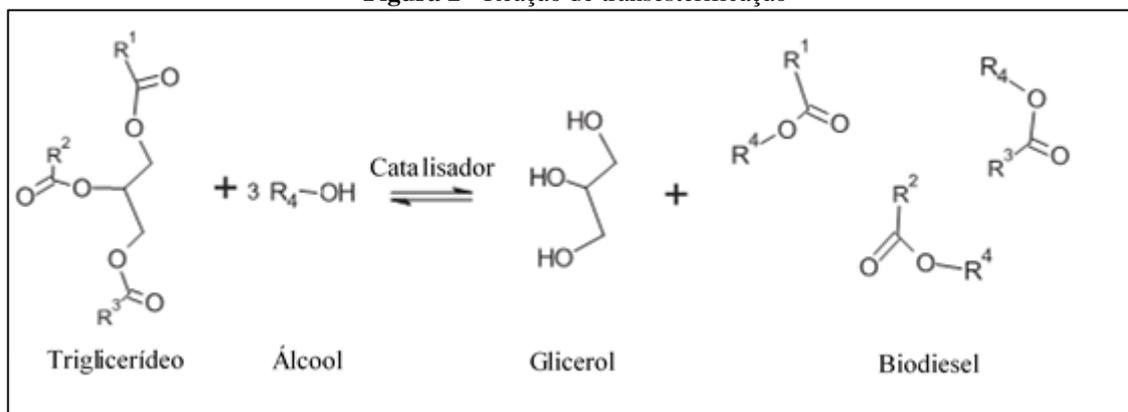
Fonte: Adaptada de ANP (2014)

Nota: (1) Inclui gordura bovina, gordura de frango e gordura de porco. (2) Inclui óleo de palma, óleo de amendoim, óleo de nabo-forrageiro, óleo de girassol, óleo de mamona, óleo de sésamo, óleo de fritura usado e outros materiais graxos.

A reação de transesterificação, esquematizada na Figura 2, geralmente é conduzida com álcoois de cadeia curta, como metanol e etanol, resultando na síntese de uma mistura de alquil

ésteres (biodiesel) e obtendo-se como subproduto um triálcool, o glicerol. O metanol, apesar de sua toxicidade, é o álcool mais amplamente utilizado por ser mais reativo, diminuindo o tempo da reação e aumentando o rendimento [1] [13].

Figura 2 - Reação de transesterificação



Fonte: LOBO *et al.* (2009)

Na transesterificação, diversos catalisadores podem ser empregados, destacando-se ácidos fortes (como os ácidos sulfúrico e sulfônico), bases fortes (hidróxidos, alcóxidos e carbonatos de sódio ou potássio), bases não-iônicas (aminas, amidinas, guanidinas, entre outras) e enzimas hidrolíticas (lipases). A catálise básica, por meio de alcóxidos de metais alcalinos, é mais empregada a nível comercial, pois é mais rápida e envolve catalisadores menos corrosivos do que os compostos ácidos [13] [14] [15].

2.1 Aspectos Técnicos, Propriedades e Qualidade do Biodiesel

A garantia da qualidade do biodiesel está diretamente ligada ao atendimento das especificações deste combustível aos padrões de qualidade, os quais são normalizados pela ANP por meio do Regulamento Técnico nº 3 da RANP 45/2014 [10]. A determinação de padrões de qualidade tem como objetivo a fixação de teores limites dos contaminantes que não prejudiquem a qualidade das emissões da queima e que assegurem o bom desempenho, a integridade do motor e a segurança no transporte e manuseio [13].

As propriedades do biodiesel, em parte, podem ser influenciadas por sua composição, a qual é diretamente dependente da matéria-prima (óleos e gorduras, vegetais e animais). Outros fatores, além da composição dos ésteres, como o processo de produção, contaminantes oriundos da matéria prima e condições de armazenamento e manuseio, podem influenciar a qualidade do biodiesel. Em outros termos, a avaliação da qualidade do biodiesel pode ser obtida através da

determinação da sua composição química e propriedades físico-químicas do combustível [16].

A Tabela 1 mostra a composição de ácidos graxos de alguns tipos de óleos [17] [18] [19].

Tabela 1 - Composição de óleos vegetais de diferentes fontes

Óleo ou Gordura	Composição de Ácidos Graxos (% massa)								
	Láurico (C12:0)	Mirístico (C14:0)	Palmítico (C16:0)	Estearico (C18:0)	Oleico (C18:1)	Linoleico (C18:2)	Linolênico (C18:3)	Ricinoleico (C18:1 OH)	Outros
Algas	0	0,6	6,9	3	75,2	12,4	1,2	0	0,7
Babaçu	48,8	17,2	6,9	4	14,2	1,8	0	0	7,1
Algodão	0	0	28,3	0,9	13,3	57,5	0	0	0
Sebo bovino	0,2	2,9	24,3	22,8	40,2	3,3	0,7	0	5,6
Canola	0	0	3,8	1,9	63,9	19	9,7	0	1,7
Mamona	0	0	0,9	1,1	3,1	4	0,6	90,3	0
Côco	47,7	18,5	9,1	2,7	6,8	2,1	0,1	0	13
Milho	0	0	12,1	1,8	27,2	56,2	1,3	0	1,4
Pinhão manso	0	0	12,7	5,5	39,1	41,6	0,2	0	0,9
Dendê	0,3	1,1	42,1	4,2	40,8	9,5	0,3	0	1,7
Colza	0,1	0	4,2	1,6	59,5	21,5	8,4	0	4,7
Soja	0,1	0,1	11,6	3,9	23,7	53,8	5,9	0	0,9
Girassol	0,1	0,1	6,4	3,6	21,6	66,2	1,5	0	0,5
Tucum	52,5	25	7,5	0,4	8,4	2,1	0	0	4,1

Fonte: Adaptada de BAJPAI e TYAJI (2006), APPLEWHITE e OTHMER (1980), GUNSTONE *et al.* (1994)

Os padrões de qualidade presentes na RANP 45/2014 foram constituídos com base nas normas da *Associação Brasileira de Normas Técnicas* (ABNT) e nas normas internacionais da *American Society for Testing and Materials* (ASTM), da *International Organization for Standardization* (ISO) e do *Comité Européen de Normalisation* (CEN). A Tabela 2 mostra diferentes padrões de qualidade para o biodiesel de distintos países [20] [10] [21].

Tabela 2 – Padrões de qualidade para biodiesel de diferentes países

Propriedades	Unidades	Brasil	USA	Europa	Alemanha	Austrália	Índia	Japão	África do Sul
		ANP	ASTM	EN	DIN		IS	JASO	SANS
		45/2014	D6751-12	14214:2012	51606		15607	M360	1935
Aspecto	-	Límpido e isento de impurezas	-	-	-	-	-	-	-
Massa específica	kg/m ³	850 - 900 a 20°C	-	860 - 900 a 15°C	875 - 900 a 15°C	860 - 890 a 15°C	860 - 900 a 15°C	860 - 900	860 - 900 a 15°C
Viscosidade cinemática a 40°C	mm ² /s	3,0 - 6,0	1,9 - 6,0	3,5 - 5,0	3,5 - 5,0	3,5 - 5,0	2,5 - 6,0	3,5 - 5,0	3,5 - 5,0
Água e sedimentos, máx.	mg/kg	200 (1)	500	500	300	500	500	500	500
Contaminação total, máx.	mg/kg	24	-	24	20	24	24	24	24
Ponto de fulgor, mín.	°C	100	93	101	110	120	120	120	120
Teor de éster, mín.	% massa	96,5	-	96,5	-	96,5	96,5	96,5	96,5
Resíduo de carbono, máx.	% massa	-	0,05 em 100% de amostra	-	0,03 em 100% de amostra	0,05 em 100% de amostra	0,05 em 100% de amostra	0,30 a 10% no resíduo de destilação da amostra	0,30 a 10% no resíduo de destilação da amostra
Cinzas sulfatadas, máx.	% massa	0,02	0,02	0,02	0,03	0,02	0,02	0,02	0,02
Enxofre total, máx.	mg/kg	10	15	10	10	15 para S15; 500 para S500	50	10	10
Sódio + Potássio, máx.	mg/kg	5	5	5	5	5	Anotar	5	5
Cálcio + Magnésio, máx.	mg/kg	5	5	5	-	5	Anotar	5	5
Fósforo, máx.	mg/kg	10	10	4	10	10	10	10	10
Corrosividade ao cobre, 3h a 50 °C, máx.	-	1	3	1	1	1 para enxofre < 10 mg/kg; 3 para enxofre > 10 mg/kg	1	1	1

Tabela 2 (cont.)

Propriedades	Unidades	Brasil	USA	Europa	Alemanha	Austrália	Índia	Japão	África do Sul
		ANP	ASTM	EN	DIN	(1)	IS	JASO	SANS
		14/2012	D6751-12	14214:2012	51606		15607	M360	1935
Ponto de névoa, máx.	°C	-	Anotar	-	-	-	-	-	-
Número de cetano, mín.	-	Anotar	47	51	49	51	50	51	51
Ponto de entupimento de filtro a frio, máx.	°C	(2)	-	(2)	-	Anotar	-	-	-4 (inverno); +3 (verão)
Filtrabilidade a frio, máx.	s	-	200	-	-	-	-	-	-
Índice de acidez, máx.	mg KOH/g	0,50	0,50	0,50	0,50	0,80	0,50	0,50	0,50
Glicerina livre, máx.	% massa	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02
Glicerina total, máx.	% massa	0,25	0,24	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
Monoglicerídeos, máx.	% massa	0,70	-	0,70	0,80	-	-	0,80	0,80
Diglicerídeos, máx.	% massa	0,20	-	0,20	0,40	-	-	0,20	0,20
Triglicerídeos, máx.	% massa	0,20	-	0,20	0,40	-	-	0,20	0,20
Metanol e/ou Etanol, máx.	% massa	0,20	0,20 ou Ponto de fulgor < 130°C	0,20	0,30	-	(3)	0,20	0,20
Índice de iodo, máx.	g I ₂ /100g	Anotar	-	120	115		Anotar	120	140
Período de indução a 110°C, mín.	h	8	3	8	-	-	6	-	6

Fonte: Adaptado de MARQUES et al. (2014)

(1) Para efeito de fiscalização, nas autuações por não conformidade, será admitida variação de +50 mg/kg no limite do teor de água no biodiesel para o produtor e de +1 50 mg/kg para o distribuidor.

(2) Ponto de entupimento de filtro a frio varia de acordo com a área de comercialização de biocombustível.

(3) Teor máximo de álcool é de 0,20% em massa de metanol ou 0,20% em massa de etanol.

O presente trabalho focaliza seis propriedades (número de cetano, viscosidade, massa específica, período de indução, índice de iodo e PEFF) das 24 propriedades estabelecidas pela RANP 45/2014, conforme foram apresentadas na Tabela 2. Ressalta-se que algumas características do biodiesel estão relacionadas ao tamanho da cadeia e à quantidade de insaturações e suas posições na cadeia [17], ou seja, estão diretamente ligadas aos ésteres de ácidos graxos que o compõem [22] [9].

Nesse contexto, os critérios estabelecidos para a escolha das seis propriedades foram a forte relação com a composição do óleo, além da disponibilidade de equipamentos para a análise das amostras no Laboratório de Pesquisa em Química Analítica (LPQA) da Universidade Federal do Maranhão (UFMA) e no Laboratório de Análises e Pesquisa em Química Analítica de Petróleo e Biocombustíveis (LAPQAP).

O número de cetano, analogamente à octanagem, é uma medida da qualidade de combustão de combustíveis diesel durante a ignição por compressão [23]. Tal propriedade está relacionada com o tempo de atraso de ignição, ou seja, quanto maior o número de cetano mais curto será o tempo de ignição [13].

O número de cetano é dependente da composição dos ésteres graxos de um biodiesel. Quanto maior as cadeias de carbono de ácidos graxos e mais saturados, maior será o número de cetano [23]. Portanto, um fator importante na redução do número de cetano é o grau de insaturação.

A viscosidade cinemática mede a resistência ao escoamento de um fluído [9] e aumenta linearmente com o tamanho das cadeias carbônicas e com o aumento do grau de saturação. Além disso, tem influência no processo de queima na câmara de combustão do motor [13]. Alta viscosidade ocasiona diminuição no fluxo de injeção e na atomização causando, conseqüentemente, combustão incompleta, provocando entupimento do filtro de combustível e gerando formação de depósitos na câmara de combustão [13] [24] [25].

A massa específica do biodiesel está diretamente ligada com a sua estrutura molecular. Quanto menor o número de insaturações presentes na molécula e maior o comprimento da cadeia carbônica do alquil éster, maior será a massa específica [13]. Além disso, a presença de contaminantes (álcool ou substâncias adulterantes) pode influenciar na massa específica do biodiesel.

O período de indução do biodiesel é uma das características intrínseca à sua composição graxa [26] e diretamente influenciada pela temperatura, fluxo de oxigênio e incidência de raios

ultravioleta onde o combustível fica exposto durante o tempo de armazenamento, além da presença de contaminantes que aceleram o processo de oxidação, como traços de metais.

Em resumo, o processo oxidativo se inicia geralmente nas duplas ligações, que se apresentam como sítios reativos (partes da molécula mais propensas a reagir) bastante suscetíveis à oxidação, principalmente quando separadas por um carbono bis-alílico ou metilênico [22] [27] [28] [29]. Portanto, a taxa de oxidação está relacionada mais com a quantidade de sítios bis-alílicos do que com o número de insaturações [30].

O índice de iodo quantifica as insaturações dos ésteres de ácidos graxos e é determinado pela quantidade de gramas de iodo que reage diretamente com as ligações duplas ou triplas entre carbonos, para 100 g de amostra. O número de insaturações não tem apenas efeitos nos valores de massa específica e viscosidade dos biodieseis, mas também no período de indução [13].

Para avaliar o desempenho do biodiesel sob baixas condições de temperatura, três características precisam ser avaliadas, as chamadas propriedades de escoamento em baixa temperatura: ponto de névoa (temperatura na qual se observa formação dos primeiros cristais do combustível num processo de resfriamento), ponto de entupimento de filtro a frio (temperatura em que as moléculas do combustível se cristalizam em tamanho suficiente para entupir o filtro e impedir o funcionamento do motor) [13] [31] e o ponto de fluidez (temperatura em que o combustível perde sua fluidez).

Os limites dessas propriedades de escoamento em baixa temperatura são estabelecidos conforme as condições climáticas da região onde o biodiesel vai ser comercializado [13] [10]. O presente trabalho se atém somente à propriedade ponto de entupimento de filtro a frio.

A estabilidade oxidativa e o comportamento em baixa temperatura são propriedades críticas favorecidas por fatores opostos. Uma diminuição no grau de insaturações, por exemplo, favorece a estabilidade à oxidação através do aumento do período de indução, porém promove desempenho indesejado do biocombustível a baixas temperaturas [9].

2.2 Panorama de Oleaginosas para a Produção de Biodiesel no Maranhão

O Maranhão é um Estado localizado no oeste da região Nordeste do Brasil, com aproximadamente 331.937 km² de extensão, abrangendo 217 municípios. Fronteiriço com a região Norte do país, o Maranhão possui uma exuberante mistura de aspectos geográficos e uma grande diversidade de ecossistemas. Além disso, o Estado do Maranhão possui uma extensão litorânea de 640 km, a qual representa 8,7% do litoral brasileiro, o segundo maior do país.

Considerando-se fatores limitantes ao uso do solo, como fertilidade, disponibilidade de água e oxigênio, entre outros, o Maranhão possui uma considerável área com aptidão agrícola, correspondente a 52,2% de suas terras [32], o que gera vantagens para a produção de biocombustíveis. Tais vantagens proporcionam considerável redução do custo da matéria-prima, cuja contribuição para o preço do biodiesel pode variar de 70% a 95% [33].

Nesse contexto, o Estado do Maranhão possui uma grande diversidade de espécies oleaginosas com potencial para inclusão no programa de biodiesel [34]. A Tabela 3 apresenta algumas dessas matrizes e suas produções no Maranhão e no Brasil, em 2011.

O dendê e o pinhão-manso, apesar de não estarem inclusos na produção do Maranhão, segundo dados do Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (IBGE) [35], também serão estudados devido ao destaque que têm recebido nos últimos anos na literatura, sendo bastante promissores para a produção de biodiesel [34] [36] [37].

Tabela 3 - Quantidades de soja, milho, algodão herbáceo, babaçu, tucum, dendê e pinhão manso produzidas pelo Brasil e pelo Maranhão em 2011 e participações do Maranhão no total da produção nacional

Produtos		Quantidade produzida em 2011 (t)		Participação do Maranhão no total da produção nacional (%)
		Brasil	Maranhão	
Lavouras temporárias	Soja	74.815.447	1.571.418	2,10
	Milho	55.660.415	646.209	1,16
	Algodão herbáceo	5.070.717	61.412	1,21
Extração vegetal	Babaçu	102.499	96.160	93,82
	Tucum	516	153	29,65
Lavouras permanentes	Dendê	1.301.192	-	0,00
	Pinhão manso	116	-	0,00

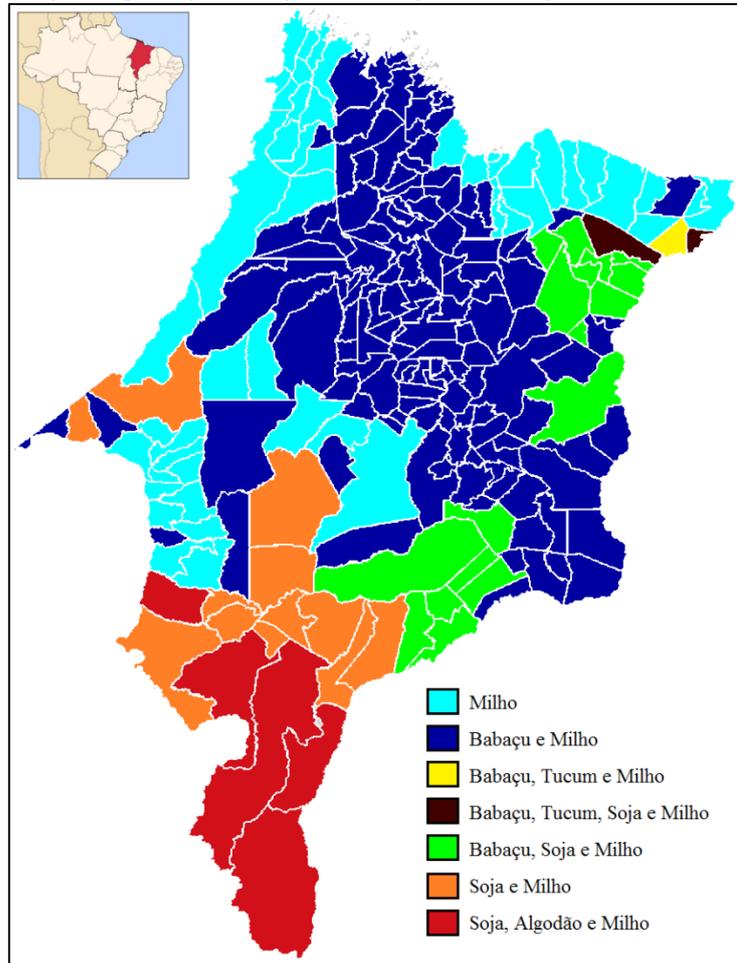
Fonte: Adaptada de IBGE (2011a), IBGE (2011b), CONAB (2012)

O mapa da Figura 3 mostra a produção de soja, milho, algodão, babaçu e tucum distribuídas pelos 217 municípios do Estado do Maranhão, a partir de dados extraídos do IBGE [38].

Nos últimos anos, a produção de soja (*Glycine max*) no Brasil tem assumido importância significativa devido a aumentos na demanda global e doméstica por derivados da soja e a intervenções governamentais para aumentar a oferta [39] [40], fazendo com que soja seja a cultura de maior valor de produção nacional [35]. Atualmente o Brasil detém a segunda posição na produção mundial de soja [41].

A soja é o terceiro produto mais cultivado no estado do Maranhão, apesar de representar apenas 2,10% da produção nacional, conforme mostrado na Tabela 3 [35]. É também a matéria-prima mais empregada para a produção de biodiesel no Brasil, sendo utilizada em 81,2% de todo o biodiesel produzido em 2011 [42].

Figura 3 - Distribuição da produção de soja, milho, algodão, babaçu e tucum no Estado do Maranhão



Fonte: Adaptada de IBGE (2011c)

O milho (*Zea mays L.*) é a terceira cultura de maior valor de produção e o terceiro mais produzido no Brasil. No Maranhão, é o quinto colocado no ranking de produção agrícola em 2011. Todavia, o Maranhão contribui com apenas 1,16% do total nacional [35].

O algodoeiro (*Gossypium hirsutum L.*) é uma espécie de grande complexidade morfológica. No Brasil, predominam as espécies de algodão arbóreo (perene) e de algodão herbáceo (anual) [43] [44]. Entretanto, a Tabela 3 apresenta dados referentes somente à produção de algodão herbáceo, já que a produção de algodão arbóreo é irrisória em comparação ao herbáceo [35].

A cultura de algodão tem sido foco de vários estudos já que o Brasil, de 2010 para 2011, teve um aumento de 71,9% em sua produção de algodão herbáceo, estimulado pela valorização do produto no mercado internacional [35]. Conseqüentemente, nesse mesmo período, o óleo de algodão teve alta de 72,2% na sua utilização para a produção nacional de biodiesel, representando 3,7% do total produzido em 2011 [42].

O babaçu é uma espécie de origem brasileira, classificada por alguns botânicos como *Orbignya oleifera*, *O. speciosa*, *O. martiana* ou ainda *O. phalerata* [45] [46]. É uma palmeira extremamente resistente e que apresenta um grande potencial de regeneração [46], cujos frutos podem ser usados para a geração de biocombustíveis como biodiesel e até mesmo etanol [47] [48].

No Brasil, a produção de babaçu se concentra no Estado do Maranhão, que produziu o equivalente a 93,82% da produção nacional em 2011, segundo dados do IBGE, apresentados na Tabela 3 [49].

A palmeira *Astrocaryum vulgare Mart*, também conhecida como tucum ou *awarra* [50], possui diversas espécies encontradas nas regiões do Nordeste e Amazônica do país [51] e floresce e frutifica durante quase o ano todo [52]. O Maranhão, mesmo produzindo apenas 153 toneladas de amêndoas em 2011 (Tabela 3), é o segundo maior produtor nacional de tucum.

O dendezeiro (*Elaeis guineense*) apresenta o maior rendimento dentre as plantas oleaginosas, que pode chegar a até 8 t/ha.ano de óleo [41]. Embora possua o maior potencial do mundo em áreas com aptidão agrícola, o Brasil é responsável por uma fração quase invariável de apenas 0,5% do total mundial de produção do óleo de dendê ou de palma [53] [54].

Uma característica interessante sobre o dendezeiro é seu enorme potencial de fixação de carbono na biomassa [55]. Segundo estudos na Malásia, um hectare de plantação de dendezeiro absorve, em média, 29,3 toneladas de gás carbônico, valor bastante significativo em comparação, por exemplo, com 3,52 toneladas de gás carbônico absorvido por hectare de plantação de soja [56].

Atualmente o maior produtor de dendê no Brasil é o Estado do Pará, responsável por 83,18% da produção nacional [35]. Apesar de não participar dessa produção [35], o Maranhão possui condições naturais compatíveis com as exigências edafoclimáticas para o plantio do dendezeiro [55] [57].

Assim como o dendê, o pinhão-manso (*Jatropha curcas L.*) é outra oleaginosa que não está inclusa na produção agrícola maranhense, apesar de já ter pelo menos 12 hectares de área plantada dessa cultura no Maranhão [58]. A cultura de pinhão-manso é bastante resistente à limitação hídrica e se adapta facilmente a regiões com condições edafoclimáticas mais estressantes [34] [37] [59].

No entanto, além de não ter sido totalmente domesticada e apresentar maturação não uniforme dos seus frutos, há pouco conhecimento técnico sobre mecanismos de controle de

pragas e doenças e sobre o tipo ideal de solo para o cultivo do pinhão-mansão, levando à baixa produtividade [34].

Apesar dessas desvantagens, o pinhão-mansão tem recebido destaque em diversas instituições de pesquisa [33] [34] [36] [37] [60], e foi até incluído como uma alternativa de matéria-prima no PNPB [61], por ser uma cultura de fácil propagação e crescimento rápido, e pelo alto teor de óleo, que pode chegar a 40% da semente [34] [59]. Além disso, a semente de pinhão-mansão é tóxica e seu óleo não é comestível, não concorrendo, portanto, com o setor alimentício [34].

No que concerne os óleos das espécies em estudo, a Tabela 4 mostra algumas características, como a composição percentual graxa, a parte do fruto de onde é extraído o óleo, o teor de óleo e o rendimento por hectare de plantação. As cadeias dos ácidos são denotadas por X:Y, onde X representa a quantidade de átomos de carbono e Y expressa o número de insaturações.

Os percentuais de ácidos graxos que compõem os óleos podem variar conforme as diversas condições do cultivo (clima, índice pluviométrico, qualidade do solo, etc.). Essas variações na composição podem ser bastante acentuadas, porém os ácidos majoritários são sempre os mesmos.

Tabela 4 - Características dos óleos vegetais das espécies em estudo

Ácidos graxos		Óleos vegetais						
Estrutura	Nomenclatura	Soja	Milho	Algodão	Babaçu	Tucum	Dendê	Pinhão manso
C 10:0	Ácido cáprico	-	-	-	6,0	2,1	-	-
C12:0	Ácido láurico	-	-	-	44,0	52,5	-	-
C 14:0	Ácido mirístico	-	-	-	17,0	25,0	-	0,1
C 16:0	Ácido palmítico	11,3	11,8	28,3	8,0	7,5	40,3	19,0
C 18:0	Ácido esteárico	3,5	2,0	0,9	4,5	0,5	3,1	5,6
C 18:1	Ácido oleico	22,5	24,8	13,3	14,0	8,4	43,4	35,3
C 18:2	Ácido linoleico	54,6	61,3	57,5	2,0	2,1	13,2	38,4
C 18:3	Ácido linolênico	8,1	-	-	-	-	-	-
Outros ácidos		-	0,1	-	4,5	1,9	-	1,6
Origem do óleo		Grão	Grão	Caroço	Amêndoa	Amêndoa	Amêndoa	Semente
Teor de óleo (%)		20	8-10	18-20	66	30-50	22	30-40
Rendimento do óleo (kg /ha)		200-600	-	361	100-300	2.550-4250	2.000 - 8.000	1.200-1.500
Referências		[1] [53]	[28] [62]	[33] [41]	[51] [63]	[51] [64]	[41] [51] [60]	[34] [37] [60]

Fonte: Autoria própria

Os óleos de soja, milho, algodão e pinhão manso são ricos em ácidos graxos insaturados, como os ácidos oleico e linoleico. Esse tipo de composição acarreta vantagens em propriedades como aquelas que avaliam o desempenho do biodiesel a baixas temperaturas (ponto de

entupimento de filtro a frio, ponto de névoa e ponto de fluidez), além de aumentar a lubrificidade do combustível [22].

Por outro lado, os óleos de babaçu, tucum e dendê, ricos em ácidos graxos saturados como o ácido láurico, mirístico e palmítico, são promissores para a produção de biodiesel com bom comportamento em propriedades como estabilidade oxidativa, número de cetano e viscosidade [22].

Diversos estudos têm sido publicados no sentido de estudar a estreita relação entre a composição e algumas propriedades do biodiesel [51] [60] [22] [24] [26] [65] [8] [28] [31].

2.3 Redes Neurais Artificiais e Aplicações

O termo Redes Neurais Artificiais (ANN, do inglês *Artificial Neural Networks*) tem sido utilizado em diversos trabalhos científicos publicados recentemente. A aplicação dessa abordagem, a qual de alguma forma assemelha-se ao modelo biológico do cérebro humano, não se limita apenas às engenharias, mas ao emprego de forma multidisciplinar [66].

Com enfoque conexionista, as ANNs surgiram como uma alternativa à abordagem simbólica baseada em lógica, no campo da Inteligência Artificial (AI). A motivação para o emprego de ANNs era justificado devido a relação entre o desempenho da abordagem conexionista e o da abordagem clássica. No segundo caso, apesar da capacidade de resolver diversos problemas complexos, se observava que, em algumas situações, como tarefas rotineiras e/ou intuitivas ao ser humano, a abordagem clássica não apresentava um desempenho satisfatório.

Historicamente, as principais publicações que introduziram as ANNs foram desenvolvidas por McCulloch e Pitts (1943), Hebb (1949) e Rosenblatt (1958). McCulloch e Pitts abordaram o modelo de neurônio artificial, uma simplificação do que se conhecia a respeito de neurônios biológicos na época [67]. Hebb, por sua vez, descreveu o modelo básico de rede de auto-organização [68], e Rosenblatt, o modelo de neurônio artificial de aprendizado supervisionado denominado *Perceptron* [69].

Em 1969, o trabalho desenvolvido por Minsky e Papert mostrava, de forma pessimista, uma grande limitação referente ao modelo formal do *Perceptron* [70]. Em termos gerais, o *Perceptron* seria capaz de resolver, adequadamente, somente problemas com dados linearmente separáveis. Tal afirmação favoreceu para que a área de IA, na década 1970, se voltasse mais para a abordagem lógica (simbólica).

estabelecido, geralmente baseados na regra de Hebb [68] [75]. Se a rede fornece bons resultados de predição, esses pesos são mantidos. Senão, a rede passará por mais ciclos de treinamento [74].

Uma característica importante das ANNs é a sua capacidade de aprendizado por meio de exemplos [76]. Todavia as redes neurais precisam de um amplo banco de dados para o treinamento, devido à sua natureza estocástica, na qual os resultados do treinamento são dependentes de parâmetros iniciais [77].

Cada algoritmo de aprendizado é desenvolvido para o ajuste de pesos (treinamento) de uma arquitetura específica [78]. A Tabela 5 faz uma associação entre paradigmas (supervisionado, não supervisionado e híbrido), regras de aprendizagem, arquiteturas, algoritmos de aprendizagem e aplicações.

Tabela 5 - Classificação de ANNs por tipos de aprendizado

Paradigma	Regra de Aprendizagem	Arquitetura	Algoritmo de Aprendizagem	Aplicação
Supervisionado	Correção do erro	Perceptron com uma camada	Algoritmos de aprendizagem do perceptron	Classificação de padrões
		Perceptron com múltiplas camadas (MLP)	Backpropagation	Aproximação de função, predição e controle
	Boltzmann	Recorrente	Algoritmo de aprendizagem de Boltzmann	Classificação de padrões
	Hebb	Multicamadas em avanço	Análise discriminante linear	Análise de dados, classificação de padrões
	Competitiva	Competitiva	Quantização do vetor de aprendizagem	Categorização em classes internas, compressão de dados
		Rede ART	ARTMAP	Classificação de padrões, categorização em classes internas
Não Supervisionado	Correção do erro	Multicamadas em avanço	Projeção de Sammon	Análise de dados
	Hebb	Em avanço ou competitiva	Análise da componente principal	Análise de dados, compressão de dados
		Rede Hopfield	Aprendizagem de memória associativa	Memória associativa
	Competitiva	Competitiva	Quantização de vetores	Categorização, compressão de dados
		SOM (Kohonen)	SOM (Kohonen)	Categorização, análise de dados
		Rede ART	ART1, ART2	Categorização
Híbrido	Correção de erros e competitiva	Rede RBF	Algoritmo de aprendizagem RBF	Classificação de padrões, aproximação de funções, predição, controle

Fonte: Adaptada de Jain *et al.* (1996)

Em geral, a escolha de uma das estruturas de ANNs apresentadas na Tabela 5 depende de diversos fatores como a complexidade do problema, dimensão do espaço de entrada, características dinâmicas ou estáticas, conhecimento a respeito do problema e representatividade dos dados.

Para o presente trabalho, se emprega o paradigma supervisionado com a arquitetura MLP como foco de estudo e aplicação. O modelo MLP é bastante utilizado na literatura para a predição de propriedades físico-químicas de biodiesel [21]. O termo supervisionado implica na utilização de um supervisor externo responsável por estimular as entradas da rede e observar a saída calculada pela mesma, comparando-a com a saída desejada.

O processo de treinamento supervisionado de ANNs de multicamadas é equivalente a um problema de otimização não-linear irrestrito, onde uma função de erro global é minimizada a partir do ajuste de pesos da rede. Em geral, a literatura oferece uma grande variedade de algoritmos de treinamentos que diferem na forma pela qual cada um procede no cálculo da direção de ajuste dos parâmetros [79].

O critério deste trabalho para a classificação dos algoritmos de otimização foi realizado através da ordem das derivadas da função objetivo. Portanto, o trabalho considerou a seguinte classificação:

- Primeira ordem: Entende-se como o grupo de algoritmos que utilizam a derivada primeira da função a ser minimizada;
- Segunda ordem: Entende-se como o grupo de algoritmos que utilizam a derivada segunda da função a ser minimizada;
- Outros (sem diferenciação): Entende-se como o grupo de algoritmos nos quais nenhuma derivada acima citada esteja envolvida.

A Tabela 6 apresenta uma lista de algoritmos classificados conforme o critério abordado anteriormente.

A simplicidade conceitual, a fácil implementação e os bons resultados obtidos em trabalhos de ANNs tornaram o algoritmo *backpropagation* um dos métodos de treinamento mais populares na literatura. Contudo, a baixa taxa de convergência do algoritmo *backpropagation* (gradiente descendente) estimula a busca por técnicas de aceleração para ao problema de otimização do tempo de convergência.

Tabela 6 - Publicações envolvendo aplicações de ANNs em combustíveis, dispostas por algoritmos

Ordem	Algoritmos	Publicações
1° Ordem	Backpropagation (Padrão)	[80] [81] [82] [83] [84] [85]
	Delta-Bar-Delta	[80]
2° Ordem	Conjugate Gradient (Gradiente Conjugado)	[80] [86] [87]
	Levenberg-Marquardt	[80] [85] [86] [87] [88] [89] [90] [91] [92] [93] [77]
	Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno	[86] [94]
	One Step Secant	[85]
Outros	Genetic Algorithms (Algoritmos Genéticos)	[95] [96] [97]
	Quickprop	[80]

Fonte: Autoria própria

Os demais algoritmos citados na Tabela 6, basicamente, são métodos de otimização aplicados ao treinamento de ANNs, com o objetivo de melhorar a taxa de convergência em relação ao algoritmo de backpropagation padrão. Além disso, a coluna denominada publicações referência a aplicação dos métodos para treinamento de ANNs em trabalhos publicados, em periódicos, na área de combustíveis.

2.4 Trabalhos Relacionados

Neste capítulo, alguns trabalhos científicos relacionados ao tema da pesquisa são selecionados e apresentados de forma resumida. A Tabela 7 apresenta, de forma organizada e sucinta, publicações recentes voltadas para predição das propriedades ligadas à composição do biodiesel e utilizadas na presente pesquisa.

Em 2006, Ramadhas *et al.* publicaram o trabalho denominado *Artificial neural networks used for the prediction of the cetane number of biodiesel*, com o objetivo de estimar a propriedade do número de cetano do biodiesel utilizando ANN, a partir da composição de ácidos graxos de óleos vegetais. Nessa pesquisa, obtiveram-se resultados na predição do número de cetano comparáveis com os valores reais dessa propriedade. Em outros termos, a pesquisa indica

que o método utilizado no artigo é eficaz para a predição do número de cetano do biodiesel e pode evitar o processo tanto demorado como dispendioso dos experimentos.

Tabela 7 - Métodos de predição aplicados à predição das propriedades do biodiesel e óleos

Propriedades	Título da Publicação	Ano	Autores
Número de Cetano	Artificial neural networks used for the prediction of the cetane number of biodiesel. [74]	2006	Ramadhass, A. S.; Jayaraj, S.; Muraleedharan, C.; Padmakumari, K.
	Inference of the biodiesel cetane number by multivariate techniques. [98]	2013	Nadai, D. V.; Simões, J. B.; Gatts, C. E. N.; Miranda, P. C. M. L.
Viscosidade	Neural network (ANN) approach to biodiesel analysis: analysis of biodiesel density, kinematic viscosity, methanol and water contents using near infrared (NIR) spectroscopy. [77]	2011	Balabin, R. M.; Lomakina, E. I.; Safieva, R. Z.
	Prediction of density and viscosity of biofuel compounds using machine learning methods. [99]	2012	Saldana, D. A.; Starck, L.; Pascal, M.; Rousseau, B.; Ferrando, N.; Creton, B.
	Neural network prediction of biodiesel kinematic viscosity at 313 K [100]	2014	Meng, X.; Jia, M.; Wang, T.
Massa Específica	Estimation of vegetables oil-based ethyl esters biodiesel densities using artificial neural networks. [101]	2008	Saeid, B.; Aroua, M. K.; Raman, A. A. A.; Sulaiman, N. M. N.
	Application of artificial neural network to predict properties of diesel – biodiesel blends. [102]	2010	Kumar, J.; Bansal, A.
Período de Indução / Estabilidade Oxidativa	Predicting oxidative stability of vegetable oils using neural network system and endogenous oil components. [103]	2000	Przybylski, R.; Zambiasi, R. C.
	Recent Developments on Statistical and Neural Network Tools Focusing on Biodiesel Quality [21]	2014	Marques, D. B.; Barradas, A. O.; Romariz, A. R. S.; Viegas, I. M. A.; Luz, D A; Barros, A. K. D.; Labidi, S.; Ferraudou, A. S.
Índice de Iodo	Near-Infrared (NIR) Spectroscopy for Biodiesel Analysis: Fractional Composition, Iodine Value, and Cold Filter Plugging Point from One Vibrational Spectrum. [104]	2011	Balabin, R. M.; Safieva, R. Z.
Ponto de Entupimento de Filtro a Frio			

Fonte: Aatoria própria

No trabalho de Nadai *et al.*, em 2013, intitulado *Inference of the biodiesel cetane number by multivariate techniques*, foi implementado um método que consiste na aplicação sucessiva de análise de componentes principais (PCA, do inglês *principal components analysis*), *fuzzy clustering* e ANNs em conjunto de dados (informação estrutural de Ressonância Magnética Nuclear de próton (^1H NMR) dos ésteres graxos de biodiesel). O objetivo da pesquisa foi obter o número de cetano de diferentes tipos de misturas complexas a partir de dados de substâncias puras (ésteres). Os autores salientaram duas características principais como determinantes para os valores de índice de cetano: o número de duplas ligações carbono-carbono e a estrutura da unidade de álcool em cada éster graxo.

Em 2011, Balabin *et al.* realizaram comparações de desempenhos de técnicas lineares e não-lineares (regressão linear múltipla (MLR, do inglês *multiple linear regression*), regressão por componentes principais (PCR, do inglês *principal components regression*), regressão por mínimos quadrados parciais (PLS, do inglês *partial least squares*), Poly-PLS, Spline-PLS e ANN) pelo trabalho denominado *Neural network (ANN) approach to biodiesel analysis: analysis of biodiesel density, kinematic viscosity, methanol and water contents using near infrared (NIR) spectroscopy*. O trabalho objetivou a predição das propriedades de biodiesel (densidade, viscosidade, teor de água e conteúdo de metanol) a partir de espectros de infravermelho próximo. Os autores sugerem o uso de ANNs cujos resultados, no trabalho em questão, foram superiores quando comparados aos modelos lineares (MLR, PCR e PLS) e aos demais não-lineares (Poly-PLS e Spline-PLS).

Na pesquisa de Saldana *et al.*, em 2012, o estudo (*Prediction of density and viscosity of biofuel compounds using machine learning methods*) abordou modelos dependentes de temperatura para a predição de densidade e viscosidade. Em outros termos, o trabalho indica a possibilidade de prever a densidade e viscosidade dinâmica em diferentes temperaturas utilizando distintas combinações de algoritmos de aprendizagem (ANN e máquinas de vetores-suporte (SVM, do inglês *support vector machine*)) e descritores.

Em 2014, Meng *et al.* com o trabalho denominado *Neural network prediction of biodiesel kinematic viscosity at 313 K* realizou a predição da propriedade de viscosidade cinemática do biodiesel a partir de redes neurais artificiais. A pesquisa utilizou 105 amostras de biodieseis coletadas da literatura e aplicou como entrada 19 tipos de FAME. Os resultados obtidos sugeriram as ANN como opção na predição da viscosidade cinemática com o coeficiente de correlação de 0,9774.

O trabalho *Estimation of vegetables oil-based ethyl esters biodiesel densities using artificial neural networks*, publicado em 2008 por Saeid *et al.*, aplicou a abordagem de ANN, com três camadas e nove neurônios na camada oculta, para prever a densidade de vários vegetais à base de óleo de ésteres etílicos de biodiesel. Os resultados obtidos, segundo os pesquisadores, tiveram uma boa concordância com os dados medidos.

Em 2010, Kumar e Bansal publicaram o trabalho designado *Application of artificial neural network to predict properties of diesel – biodiesel blends*, a ideia foi avaliar ferramentas de determinação de propriedades de misturas diesel-biodiesel. As técnicas tanto linear PLS como não-linear ANN, com variações nas arquiteturas e algoritmos de treinamento, foram usadas para estimar ponto de fulgor, ponto de combustão, densidade e viscosidade do óleo diesel e misturas de biodiesel. Os pesquisadores concluíram que os melhores resultados foram obtidos por ANN.

O trabalho *Recent Developments on Statistical and Neural Network Tools Focusing on Biodiesel Quality*, publicado em 2014 por Marques *et al.*, realizou uma revisão literária sobre recentes trabalhos preditivos de propriedades físico-químicas de biodiesel. Além disso, o autor fez um estudo de caso aplicando redes neurais artificiais na predição da propriedade de período de indução.

Na pesquisa de Przybylski e Zambiasi, em 2000, intitulado *Predicting oxidative stability of vegetable oils using neural network system and endogenous oil components*, foi avaliado a aplicação de ANN para prever a estabilidade do óleo vegetal, com base na composição química. Em resumo, o trabalho indica que uma boa previsibilidade da estabilidade dos óleos armazenados pode ser obtida usando a composição em ácidos graxos e teor total de tocoferóis e tocotrienóis.

Em 2011, Balabin e Safieva novamente realizaram comparações de desempenhos de técnicas lineares e não-lineares. A principal diferença entre o trabalho de *Neural network (ANN) approach to biodiesel analysis: analysis of biodiesel density, kinematic viscosity, methanol and water contents using near infrared (NIR) spectroscopy*, citado anteriormente, para *Near-Infrared (NIR) Spectroscopy for Biodiesel Analysis: Fractional Composition, Iodine Value, and Cold Filter Plugging Point from One Vibrational Spectrum* está nas propriedades estudadas. O segundo trabalho aborda a predição das propriedades índice de iodo e ponto de entupimento de filtro a frio a partir de espectros de infravermelho próximo. Os autores, novamente, sugerem o uso de ANNs devido aos melhores resultados e concluem o biodiesel como um objeto de estudo não-linear.

3 METODOLOGIA

A aplicação de ANNs seguiu uma metodologia que compreende diversas etapas. O primeiro passo é a definição do problema, ou seja, é verificado se as características do problema em questão são condizentes com o uso de uma ANN.

Para a certificação da presente pesquisa como compatível à aplicação de ANNs, foi realizado, em primeira instância, um estudo por meio de artigos científicos na área de predição das propriedades de biodiesel [80] [97] [99]. Nesse contexto, foram separados os artigos que usaram técnicas de predição lineares e não-lineares, além de compará-las a fim de analisar os melhores resultados. Em seguida, o processo de modelagem do sistema foi mostrado no subcapítulo 3.1 Sistema Proposto para Predição de Propriedades de Biodiesel relacionadas à composição.

As etapas seguintes, tanto a definição e preparo dos dados como o treinamento e teste da rede, foram detalhadas nos subcapítulos denominados 3.2 Preparo das Amostras e Dados utilizados, 3.3 Aplicação de Redes Neurais e 3.4 Modelos Lineares.

3.1 Sistema Proposto para Predição de Propriedades de Biodiesel relacionadas à Composição

Neste capítulo, são mostrados a estrutura e os sistemas desenvolvidos (Oleodata e ProOleo) para avaliar o potencial de uma matriz de biodiesel e predizer as seis propriedades físico-químicas citadas neste trabalho. A Figura 5 mostra de forma geral a estrutura elaborada na pesquisa.

A primeira etapa consistiu no desenvolvimento do sistema Oleodata, que é responsável pelo gerenciamento, organização, padronização e compartilhamento dos dados obtidos no processo de produção de biodiesel. A Figura 6 apresenta, de forma resumida, as principais ações, para as operações relacionadas ao óleo, do Oleodata pelo modelo de caso de uso.

Figura 5 - Estrutura geral dos sistemas Oleodata e ProOleo

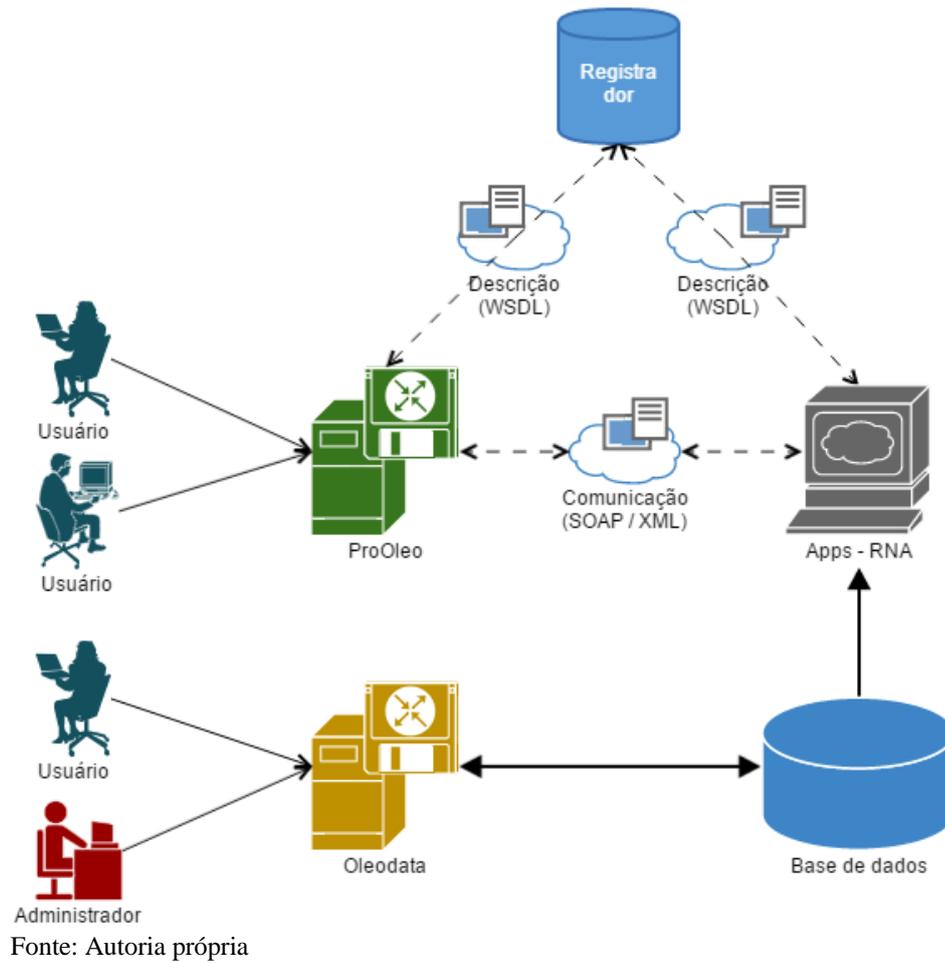
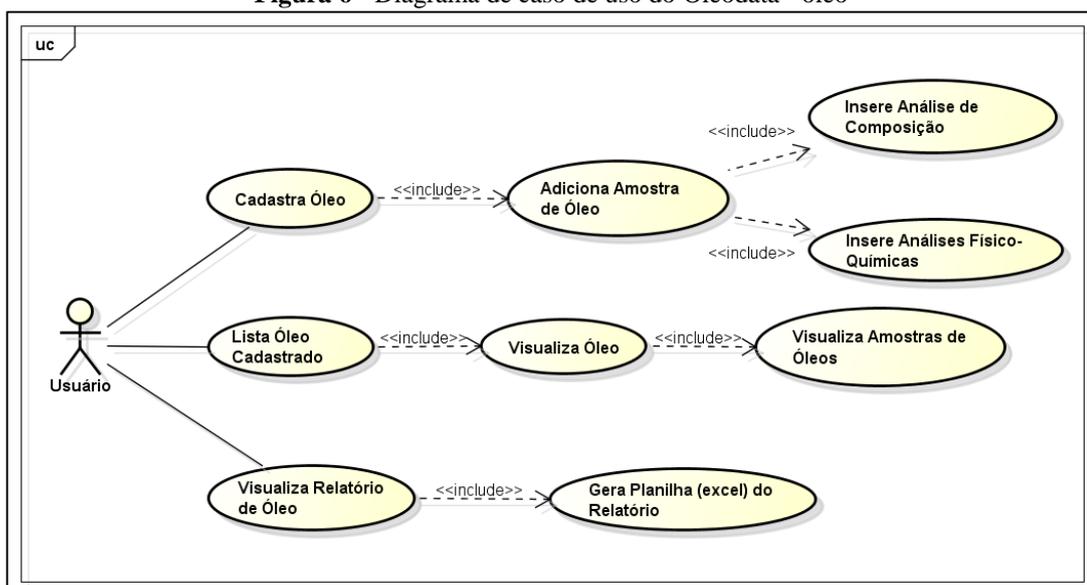


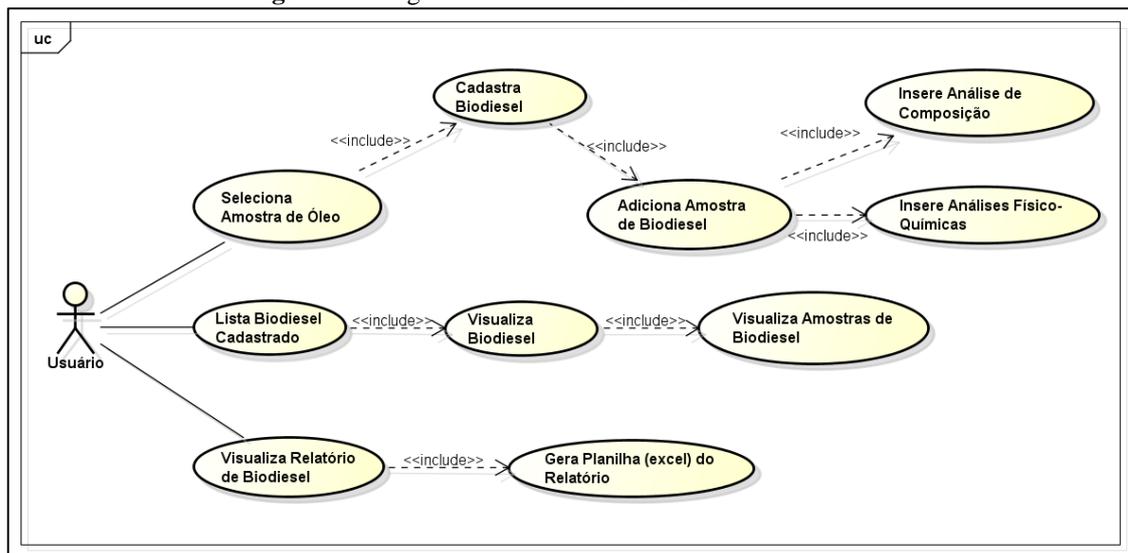
Figura 6 - Diagrama de caso de uso do Oleodata - óleo



Fonte: Autoria própria

O ator, Usuário, representa o usuário com recursos administrativos responsável pela manutenção (cadastro, alteração e exclusão) do óleo no Oleodata. Para cada óleo cadastrado é inserido de 0 a n amostra(s) derivadas desse óleo, onde a primeira amostra, denominada “amostra zero”, é a réplica do óleo cadastrado, e as demais amostras, caso necessária a inserção, são alterações realizadas no óleo (exemplo: óleo + adição do éster do ácido linoleico). As análises tanto de composição como físico-químicas podem ser inseridas e associadas a cada amostra de óleo.

Figura 7 - Diagrama de caso de uso do Oleodata - biodiesel



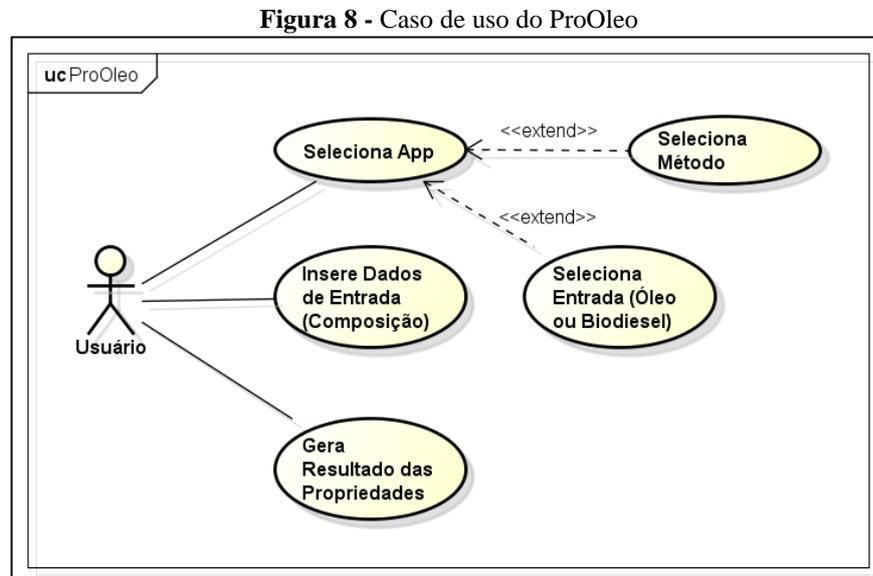
Fonte: Autoria própria

Os recursos e operações realizadas para a manutenção do biodiesel são similares aos do óleo. Contudo, para o cadastro do biodiesel é necessário selecionar uma amostra de óleo cadastrada e associar esta amostra ao biodiesel que será cadastrado. Caso o usuário não tenha realizado o processo anterior do óleo, será possível associar o biodiesel a um tipo de óleo denominado padrão.

A segunda etapa compôs a implementação de um aplicativo (Apps - ANN) que tem como função a execução da rede neural artificial obtida para cada uma das seis propriedades físico-químicas. Os recursos da aplicação, a predição das propriedades, ficam disponíveis na rede para outras aplicações por uma tecnologia de Web Service.

O ProOleo é uma interface web que invoca os serviços dos aplicativos (Apps - ANN) e interage com os usuários. Os dados entre os aplicativos são formatados em *eXtensible Markup Language* (XML) com determinadas regras e enviados normalmente por Protocolo de Transferência de Hipertexto (HTTP, do inglês *Hypertext Transfer Protocol*), e o Protocolo

Simple de Acesso a Objetos (SOAP, do inglês *Simple Object Access Protocol*) providencia o transporte de dados para os Web Services. A Figura 8 mostra as principais atividades do ProOleo.



Fonte: Autoria própria

O primeiro passo do usuário é acessar o ProOleo e selecionar o aplicativo de predição desejado. Em seguida, o método que gerou o melhor resultado será escolhido automaticamente assim como suas configurações-padrão, embora o usuário possa optar pelo uso de outro método disponível pelo aplicativo. Nesse caso, o aplicativo irá buscar a arquitetura que obteve o melhor resultado utilizando o método selecionado pelo usuário.

Uma outra observação importante é que o usuário pode optar por prever as propriedades de biodiesel a partir da composição do óleo ou da composição do biodiesel. Por padrão os aplicativos utilizam a composição do óleo como entrada.

Na próxima etapa, o usuário insere os dados de entrada, ou seja, a composição do óleo (caso o usuário não tenha optado pela composição do biodiesel). Por fim, é gerado o resultado estimando os valores das propriedades de um biodiesel feito a partir da composição de ácidos graxos do óleo inserido.

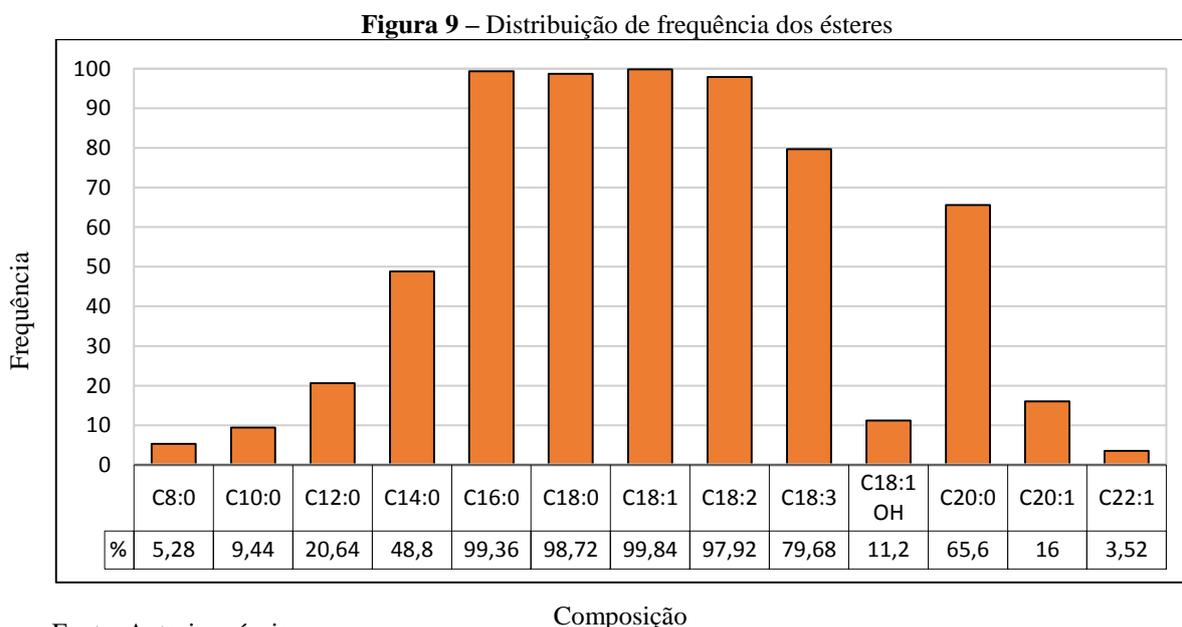
Em termos gerais, os sistemas mostrados foram desenvolvidos utilizando as linguagens *Hypertext Preprocessor* (PHP), Java e JavaScript para a implementação e o sistema gerenciador de banco de dados (SGBD) MySQL para a base de dados.

3.2 Preparo das Amostras e Dados utilizados

O processo de aprendizado de uma ANN se baseia nos dados usados para extrair um modelo geral. Portanto, é de grande relevância que se disponha de dados em quantidade e qualidade adequadas, a fim de evitar modelos impróprios.

Nesta etapa, uma base de dados que contém a composição química e seis parâmetros físico-químicos (viscosidade, índice de iodo, período de indução, massa específica, número de cetano e ponto de entupimento de filtro a frio) de amostras de biodiesel foi elaborada com dois tipos de dados experimentais: uma parte dos dados foi cedida pelo Laboratório de Análise e Pesquisa em Química Analítica de Petróleo (LAPQAP / UFMA), e a outra parte foi obtida a partir de dados da literatura [2] [9] [26] [33] [105] [106] [107] [108] [109] [110] [111] [112] [60] [51] [98] [113] [74] [8] [114]. As amostras cedidas pelo LAPQAP foram submetidas à análise de composição pelo cromatógrafo a gás Varian 450-GC, por uma adaptação do método EM 14103:2011.

As composições de todas as amostras compreendem 13 ésteres metílicos dos seguintes ácidos graxos (FAME, do inglês *fatty acid methyl ester*): ácido caprílico (C8:0), ácido cáprico (C10:0), ácido láurico (C12:0), ácido mirístico (C14:0), ácido palmítico (C16:0), ácido esteárico (C18:0), ácido oleico (C18:1), ácido linoleico (C18:2), ácido linolênico (C18:3), ácido araquídico (C20:0), ácido gadoleico (C20:1), ácido erúcido (C22:1) e ácido ricinoleico (C18:1 OH). A distribuição de frequência, em porcentagem, dos 13 ésteres tipos empregados podem ser vistos na Figura 9.



Fonte: Autoria própria

Composição

Os ésteres metílicos de ácidos graxos mais comuns nas amostras foram C14:0, C16:0, C18:0, C18:1, C18:2, C18:3 e C20:0, mostrando coerência com alguns trabalhos da literatura [9] [100]. Alguns ésteres menos frequentes na maioria das amostras podem ser majoritários em certas matérias-primas, como o éster C18:1 OH que, apesar de estar presente em apenas 11,2% das amostras, representa 90,3% da composição de uma amostra de biodiesel de mamona [112].

As análises das propriedades físico-químicas referentes as amostras cedidas pelo LAPQAP, exceto o número de cetano, foram realizadas pelos métodos e equipamentos descritos na Tabela 8. A aquisição dos dados correspondentes ao número de cetano foram obtidas exclusivamente da literatura.

Tabela 8 - Métodos e equipamentos utilizados para as análises dos biodieseis

PROPRIEDADE	MÉTODO UTILIZADO	MARCA DO EQUIPAMENTO
Viscosidade	ASTM D445	Herzog
Massa específica	ABNT NBR 14065	Anton Paar
Período de indução	EN 14112	Metrohm
Índice de iodo	EN 14111	Kem
Ponto de entupimento de filtro a frio	ABNT NBR 14747	Herzog

Fonte: Autoria própria

A Tabela 9 mostra algumas informações sobre a base de dados. A faixa de variação dos seis parâmetros de todas as amostras estudadas compreende os limites especificados pelas principais resoluções adotadas para garantir a qualidade do biodiesel: EN 14214:12 ASTM D6751-12 e RANP 45/2014.

Tabela 9 - Informações sobre os dados das amostras de biodiesel e especificações dos parâmetros de qualidade estudados

Parâmetro	N° de Amostras	Unid.	Variações dos parâmetros nas amostras		Limites		
			Mínimo	Máximo	EN 14214:2012	ASTM D6751-12	RANP 45/2014
Viscosidade	98	mm ² /s	2,73	15,25	3,5-5,0	1,9-6,0	3,0-6,0
Índice de Iodo	98	g/100g	14,67	171,50	120	-	-
Período de Indução (mínimo)	98	h	0,20	35,50	8	3	8
N° de Cetano	149	-	25,46	67,47	51	47	Anotar
Massa Específica	98	kg/m ³	807,30	915,70	860 – 900 a 15°C	-	850 – 900 a 20°C
PEFF	84	°C	-20,00	17,00	*	-	*

* Ponto de entupimento de filtro a frio varia de acordo com a área de comercialização do biodiesel.

Fonte: Autoria própria

3.3 Aplicação de Redes Neurais

No presente estudo, as unidades de entrada correspondem a 13 neurônios, que representam as porcentagens de massa de ésteres que compõem as amostras de biodiesel, seguido por duas camadas ocultas. A camada de saída é constituída por uma das propriedades físico-químicas (viscosidade, índice de iodo, período de indução, massa específica, número de cetano e ponto de entupimento de filtro a frio), isto é, cada propriedade possui tanto uma arquitetura como uma base de dados distinta, uma vez que elas são tratadas de forma independente.

O treinamento da ANN foi realizado utilizando o software Matlab R2013a desenvolvido pela MathWorks®, através de um script próprio desenvolvido com o objetivo de ter mais flexibilidade no processo de otimização das redes. O processo de otimização das redes neurais ocorreu em três etapas: teste dos algoritmos para ajustar pesos, teste da condição de parada e teste das funções de ativação (ou funções de transferência). Os três testes foram realizados para cada propriedade físico-química. A Tabela 10 resume as variações dos parâmetros durante os testes.

No processo de treinamento das ANNs, em primeiro lugar, os pesos foram definidos aleatoriamente, apenas com a finalidade de ter uma rede para iniciar o treinamento. As entradas foram apresentadas à rede e propagadas pelos neurônios.

Uma vez que propagadas as entradas, a saída foi calculada (valor previsto), bem como o erro de predição. Neste processo, a arquitetura da rede foi fixada e os únicos parâmetros ajustáveis para as correções foram os pesos.

Tabela 10 - Especificações dos parâmetros para otimização das ANNs

Parâmetros	Especificações
Funções de ativação: camadas ocultas	Tangente hiperbólica (Tanh), Logística (Logsig)
Funções de ativação: camada de saída	Linear
Método de convergência:	Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS), Fletcher-Reeves conjugate gradient, Gradient descent with momentum, Levenberg–Marquardt (LM), One-step secant, Resilient
Número de neurônios: camadas ocultas	3 – 25
<i>k</i> -fold: particionamento dos dados	<i>k</i> = 11
Função de erro:	Erro quadrático médio (MSE)
Condição de parada:	Número máximo de épocas = 10.000 Performance target (MSE) = 0 Número máximo de falhas = 6, 10, 15, 20, 25, 30

Fonte: Autoria própria

A divisão da base de dados foi realizada pelo método de validação cruzada *k*-fold, para *k* = 11, ou seja, as amostras foram distribuídas aleatoriamente em 11 partições de aproximadamente a mesma quantidade de amostras: 9 partições foram reservadas para treinamento, 1 partição para validação e 1 partição para teste.

3.4 Modelos lineares

Equações de MLR foram desenvolvidas para estimar as propriedades estudadas (viscosidade, índice de iodo, período de indução, número de cetano, massa específica e ponto de entupimento de filtro a frio) a partir da composição de biodiesel, com base no banco de dados do presente estudo. O modelo geral da equação gerada por MLR é dada pela Eq. (1), onde *Y* é o parâmetro a ser estimado, *a* é a interseção, *b_n* são os coeficientes de cada variável independente e *X_n* corresponde às variáveis independentes. As equações obtidas por MLR são apresentadas na Tabela 11.

$$Y = a + b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_3 + \dots + b_nX_n \quad \text{Eq. (1)}$$

Outros métodos para predição das propriedades de viscosidade, índice de iodo, período de indução, número de cetano, massa específica e ponto de entupimento de filtro a frio disponíveis na literatura também foram usadas para comparação com os resultados obtidos por MLR e ANN do presente estudo. As equações que foram selecionadas compõem a Tabela 11. Trata-se de modelos lineares com base na composição de biodiesel.

Tabela 11 - Modelos lineares para predição das propriedades de viscosidade, índice de iodo, período de indução, número de cetano, massa específica e ponto de entupimento de filtro a frio

Parâmetros	Notação	Modelo da equação	Variáveis	Ref.
Viscosidade	MLR	$V = 2,7251 + (0,12579 \times C8:0) + (-0,38892 \times C10:0) + (0,00446 \times C12:0) + (0,06446 \times C14:0) + (0,01904 \times C16:0) + (0,00905 \times C18:0) + (0,02349 \times C18:1) + (0,01363 \times C18:2) + (0,00745 \times C18:3) + (0,1228 \times C18:1\ OH) + (0,06315 \times C20:0) + (0,00597 \times C20:1) + (0,03667 \times C22:1)$	<p>V = viscosidade do biodiesel</p> <p>C8:0 = % em massa do éster metílico do ácido caprílico</p> <p>C10:0 = % em massa do éster metílico do ácido cáprico</p> <p>C12:0 = % em massa do éster metílico do ácido láurico</p> <p>C14:0 = % em massa do éster metílico do ácido mirístico</p> <p>C16:0 = % em massa do éster metílico do ácido palmítico</p> <p>C18:0 = % em massa do éster metílico do ácido esteárico</p> <p>C18:1 = % em massa do éster metílico do ácido oleico</p> <p>C18:2 = % em massa do éster metílico do ácido linoleico</p> <p>C18:3 = % em massa do éster metílico do ácido linolênico</p> <p>C18:1 OH = % em massa do éster metílico do ácido ricinoleico</p> <p>C20:0 = % em massa do éster metílico do ácido araquídico</p> <p>C20:1 = % em massa do éster metílico do ácido gadoleico</p> <p>C22:1 = % em massa do éster metílico do ácido erúico</p>	*
	Modelo 1	$V = 1,82 - 55,3(C18:3)^2 - 10,3(C18:1)^2 + 5,11(2 \times C18:1) + 0,162(4 \times C18:2) + 4,95(C22:1)$	<p>V = viscosidade do biodiesel</p> <p>C18:1 = fração de massa do éster metílico do ácido oleico</p> <p>C18:2 = fração de massa do éster metílico do ácido linoleico</p> <p>C18:3 = fração de massa do éster metílico do ácido linolênico</p> <p>C22:1 = fração de massa do éster metílico do ácido erúico</p>	[115]
	Modelo 2	$\ln(\eta_i) = -12,503 + 2,496 \times \ln(M_i) - 0,178 \times N$	<p>η_i = viscosidade do éster metílico puro 'i'</p> <p>M_i = massa molar do éster metílico 'i'</p> <p>N = número de ligações duplas do éster metílico 'i'</p>	[116]
	Modelo 3	$KV_{pr} = \sum x_i KV_i$	<p>KV_{pr} = viscosidade do biodiesel</p> <p>x_i = fração de massa do éster metílico 'i'</p> <p>KV_i = viscosidade do éster metílico puro 'i'</p>	[117]
Índice de Iodo	MLR	$II = -6,9512 + (-1,01098 \times C8:0) + (4,71488 \times C10:0) + (0,20634 \times C12:0) + (-0,58867 \times C14:0) + (-0,1825 \times C16:0) + (1,01984 \times C18:0) + (1,14504 \times C18:1) + (1,72482 \times C18:2) + (1,99429 \times C18:3) + (1,04122 \times C18:1\ OH) + (3,00665 \times C20:0) + (2,11614 \times C20:1) + (-0,13725 \times C22:1)$	<p>II = índice de iodo do biodiesel</p> <p>C8:0 = % em massa do éster metílico do ácido caprílico</p> <p>C10:0 = % em massa do éster metílico do ácido cáprico</p> <p>C12:0 = % em massa do éster metílico do ácido láurico</p> <p>C14:0 = % em massa do éster metílico do ácido mirístico</p> <p>C16:0 = % em massa do éster metílico do ácido palmítico</p> <p>C18:0 = % em massa do éster metílico do ácido esteárico</p> <p>C18:1 = % em massa do éster metílico do ácido oleico</p> <p>C18:2 = % em massa do éster metílico do ácido linoleico</p> <p>C18:3 = % em massa do éster metílico do ácido linolênico</p>	*

Tabela 11 - (Continuação).

			C18:1 OH = % em massa do éster metílico do ácido ricinoleico C20:0 = % em massa do éster metílico do ácido araquídico C20:1 = % em massa do éster metílico do ácido gadoleico C22:1 = % em massa do éster metílico do ácido erúcico	
	Modelo 4	$II = \sum 100 \times \frac{A_f \times 253,81 \times db}{MW_f}$	II = índice de iodo do biodiesel A _f = fração de massa do éster metílico puro 'f' db = número de ligações duplas do éster metílico 'f' MW _f = peso molecular do éster metílico 'f'	[118]
	Modelo 5	$II = 35,9 - (0,212 \times P) + (0,660 \times S) + 0,448 \times O + (1,23 \times L) + (1,73 \times LL)$	II = índice de iodo do biodiesel P = % em massa do éster metílico do ácido palmítico S = % em massa do éster de metilo do ácido esteárico O = % em massa do éster metílico do ácido oleico L = % em massa do éster metílico do ácido linoleico LL = % em massa do éster metílico de ácido linolênico	[119]
	Modelo 6	$II = 0,6683 \times DU + 25,0364$ $DU = (C_n:1) + 2 \times (C_n:2) + 3 \times (C_n:3) + 4 \times (C_n:4)$	II = índice de iodo do biodiesel DU = grau de insaturação C _n :1 = % em massa do CX:1 C _n :2 = % em massa do CX:2 C _n :3 = % em massa do CX:3 C _n :4 = % em massa do CX:4	[120]
Período de Indução	MLR	$PI = 6,1924 + (0,85242 \times C8:0) + (-1,31462 \times C10:0) + (0,24307 \times C12:0) + (0,23174 \times C14:0) + (0,15171 \times C16:0) + (-0,13884 \times C18:0) + (0,01139 \times C18:1) + (-0,07447 \times C18:2) + (-0,06931 \times C18:3) + (0,07772 \times C18:1 OH) + (-0,67244 \times C20:0) + (-0,05735 \times C20:1) + (-0,07329 \times C22:1)$	IP = período de indução do biodiesel C8:0 = % em massa do éster metílico do ácido caprílico C10:0 = % em massa do éster metílico do ácido cáprico C12:0 = % em massa do éster metílico do ácido láurico C14:0 = % em massa do éster metílico do ácido mirístico C16:0 = % em massa do éster metílico do ácido palmítico C18:0 = % em massa do éster metílico do ácido esteárico C18:1 = % em massa do éster metílico do ácido oleico C18:2 = % em massa do éster metílico do ácido linoleico C18:3 = % em massa do éster metílico do ácido linolênico C18:1 OH = % em massa do éster metílico do ácido ricinoleico C20:0 = % em massa do éster metílico do ácido araquídico C20:1 = % em massa do éster metílico do ácido gadoleico C22:1 = % em massa do éster metílico do ácido erúcico	*
	Modelo 7	$Y = \frac{117,9295}{X} + 2,5905$	Y = período de indução do biodiesel X = soma do percentual de massa dos ésteres metílicos linoleico e linolênico	[26]
	Modelo 8	$OS = -0,234(X) + 22,318$	OS = estabilidade oxidativa (período de indução) do biodiesel	[121]

Tabela 11 - (Continuação).

			X = soma dos ésteres metílicos insaturados	
	Modelo 9	$OS_{pr} = \sum x_i OS_i$	OS_{pr} = estabilidade oxidativa (período de indução) do biodiesel x_i = fração de massa do éster metílico 'i' OS_i = estabilidade oxidativa do éster metílico puro 'i'	[117]
Número de Cetano	MLR	$NC = 56,0020 + (2,26860 \times C8:0) + (-0,34605 \times C10:0) + (0,09137 \times C12:0) + (0,12574 \times C14:0) + (0,12630 \times C16:0) + (0,14108 \times C18:0) + (-0,00865 \times C18:1) + (-0,15162 \times C18:2) + (-0,41044 \times C18:3) + (0,00000 \times C18:1 OH) + (0,11470 \times C20:0) + (0,63051 \times C20:1) + (0,03086 \times C22:1)$	NC = número de cetano do biodiesel $C8:0$ = % em massa do éster metílico do ácido caprílico $C10:0$ = % em massa do éster metílico do ácido cáprico $C12:0$ = % em massa do éster metílico do ácido láurico $C14:0$ = % em massa do éster metílico do ácido mirístico $C16:0$ = % em massa do éster metílico do ácido palmítico $C18:0$ = % em massa do éster metílico do ácido esteárico $C18:1$ = % em massa do éster metílico do ácido oleico $C18:2$ = % em massa do éster metílico do ácido linoleico $C18:3$ = % em massa do éster metílico do ácido linolênico $C18:1 OH$ = % em massa do éster metílico do ácido ricinoleico $C20:0$ = % em massa do éster metílico do ácido araquídico $C20:1$ = % em massa do éster metílico do ácido gadoleico $C22:1$ = % em massa do éster metílico do ácido erúico	*
	Modelo 10	$NC = 61,1 + 0,088x_2 + 0,133x_3 + 0,152x_4 - 0,101x_5 - 0,039x_6 - 0,243x_7 - 0,395x_8$	NC = número de cetano do biodiesel x_2 = % em massa do éster metílico do ácido mirístico x_3 = % em massa do éster metílico do ácido palmítico x_4 = % em massa do éster metílico do ácido esteárico x_5 = % em massa do éster metílico do ácido palmitoleico x_6 = % em massa do éster metílico do ácido oleico x_7 = % em massa do éster metílico do ácido linoleico x_8 = % em massa do éster metílico do ácido linolênico	[113]
	Modelo 11	$NC_{BDF} = 62,2 + (0,017L) + (0,074M) + (0,115P) + (0,077S) - (0,103O) - (0,279LI) - (0,366LL)$	NC_{BDF} = número de cetano do biodiesel L = % em massa do éster metílico do ácido láurico M = % em massa do éster metílico do ácido mirístico P = % em massa do éster metílico do ácido palmítico S = % em massa do éster metílico do ácido esteárico O = % em massa do éster metílico do ácido oleico LI = % em massa do éster metílico do ácido linoleico LL = % em massa do éster metílico do ácido linolênico	[122]
	Modelo 12	$NC_{BDF} = 3,930N_c - 15,936N_{DB}$	NC_{BDF} = número de cetano do biodiesel N_c = média ponderada do número de átomos de carbono N_{DB} = média ponderada do número de ligações duplas	[123]

Tabela 11 - (Continuação).

Massa Específica	MLR	$ME = 923,2381 + (-2,61576 \times C8:0) + (-0,20068 \times C10:0) + (-0,77755 \times C12:0) + (-0,20653 \times C14:0) + (-0,55546 \times C16:0) + (-0,44008 \times C18:0) + (-0,44153 \times C18:1) + (-0,45891 \times C18:2) + (-0,14717 \times C18:3) + (-0,06645 \times C18:1\ OH) + (-1,93199 \times C20:0) + (-0,84230 \times C20:1) + (-1,56281 \times C22:1)$	<p><i>ME</i> = massa específica do biodiesel</p> <p>C8:0 = % em massa do éster metílico do ácido caprílico</p> <p>C10:0 = % em massa do éster metílico do ácido cáprico</p> <p>C12:0 = % em massa do éster metílico do ácido láurico</p> <p>C14:0 = % em massa do éster metílico do ácido mirístico</p> <p>C16:0 = % em massa do éster metílico do ácido palmítico</p> <p>C18:0 = % em massa do éster metílico do ácido esteárico</p> <p>C18:1 = % em massa do éster metílico do ácido oleico</p> <p>C18:2 = % em massa do éster metílico do ácido linoleico</p> <p>C18:3 = % em massa do éster metílico do ácido linolênico</p> <p>C18:1 OH = % em massa do éster metílico do ácido ricinoleico</p> <p>C20:0 = % em massa do éster metílico do ácido araquídico</p> <p>C20:1 = % em massa do éster metílico do ácido gadoleico</p> <p>C22:1 = % em massa do éster metílico do ácido erúico</p>	*
	Modelo 13	$\rho_i = 0,8463 + \frac{4,9}{M_i} + 0,0118 \times N$	<p>ρ_i = massa específica do éster metílico puro 'i'</p> <p>M_i = peso molecular do éster metílico 'i'</p> <p>N = número de ligações duplas do éster metílico 'i'</p>	[116]
	Modelo 14	$\rho_i = 1,069 + \frac{3,575}{M_i} + 0,0113 \times N - 7,41 \times 10^{-4} \times T$	<p>ρ_i = massa específica do éster metílico puro 'i'</p> <p>M_i = peso molecular do éster metílico 'i'</p> <p>N = número de ligações duplas do éster metílico 'i'</p> <p>T = temperatura em K (neste trabalho T = 293,15 K = 20 °C)</p>	[124]
	Modelo 15	$Y = (0,91613 - 0,00045x_1 - 0,000794x_2 - 0,00061x_3 - 0,00033x_4 - 0,0005x_5 - 0,00039x_6) \times 1000$	<p>Y = massa específica do biodiesel</p> <p>x_1 = % em massa do éster metílico do ácido palmítico</p> <p>x_2 = % em massa do éster metílico do ácido esteárico</p> <p>x_3 = % em massa do éster metílico do ácido oleico</p> <p>x_4 = % em massa do éster metílico do ácido linoleico</p> <p>x_5 = % em massa do éster metílico do ácido linolênico</p> <p>x_6 = % em massa do éster metílico do ácido erúico</p>	[125]
EFF	MLR	$PEFF = 2,5980 + (-25,62401 \times C8:0) + (-12,47612 \times C10:0) + (1,06812 \times C12:0) + (0,85988 \times C14:0) + (0,28078 \times C16:0) + (0,19562 \times C18:0) + (-0,11683 \times C18:1) + (-0,13674 \times C18:2) + (-0,24579 \times C18:3) + (-0,04297 \times C18:1\ OH) + (2,75940 \times C20:0) +$	<p><i>PEFF</i> = ponto de entupimento de filtro a frio do biodiesel</p> <p>C8:0 = % em massa do éster metílico do ácido caprílico</p> <p>C10:0 = % em massa do éster metílico do ácido cáprico</p> <p>C12:0 = % em massa do éster metílico do ácido láurico</p> <p>C14:0 = % em massa do éster metílico do ácido mirístico</p> <p>C16:0 = % em massa do éster metílico do ácido palmítico</p> <p>C18:0 = % em massa do éster metílico do ácido esteárico</p> <p>C18:1 = % em massa do éster metílico do ácido oleico</p> <p>C18:2 = % em massa do éster metílico do ácido linoleico</p> <p>C18:3 = % em massa do éster metílico do ácido linolênico</p>	*

Tabela 11 - (Continuação).

		$(0,94423 \times C20:1) + (-0,62347 \times C22:1)$	C18:1 OH = % em massa do éster metílico do ácido ricinoleico C20:0 = % em massa do éster metílico do ácido araquídico C20:1 = % em massa do éster metílico do ácido gadoleico C22:1 = % em massa do éster metílico do ácido erúcido	
	Modelo 16	$PEFF = 0,511(PAME) - 7,823$ ($0 < PAME < 45$)	PEFF = ponto de entupimento de filtro a frio do biodiesel PAME = % em massa do éster metílico do ácido palmítico	[126]
	Modelo 17	$PEFF = -0,561(X) + 43,967$ ($0 < X \leq 84$)	PEFF = ponto de entupimento de filtro a frio do biodiesel X = total de ésteres metílicos de ácidos graxos insaturados	[126]
	Modelo 18	$Y = -0,4880(X) + 36,0548$ ($0 < X \leq 88$) $Y = -2,7043(X) + 232,0036$ ($88 < X \leq 100$)	Y = ponto de entupimento de filtro a frio do biodiesel X = teor de ésteres metílicos de ácidos graxos insaturados	[26]

*Presente trabalho
Fonte: Autoria própria

4 RESULTADOS

As amostras de biodiesel foram empregadas para o processo de desenvolvimento (treinamento e validação) e para o teste do método ANN. O modelo de regressão linear usou as mesmas amostras de treinamento e validação da ANN para calibração. No entanto, os métodos linear (MLR) e não-linear (ANN) desenvolvidos foram aplicados nas mesmas amostras de teste para fins de comparação.

Métodos lineares a partir da literatura também foram aplicados nas amostras de teste de biodiesel apenas para comparação com os resultados de MLR e ANN. Os resultados dos valores preditos pelos métodos lineares (MLR e equações da literatura), bem como os melhores resultados das três etapas do desenvolvimento da ANN foram comparados e discutidos nesta seção.

Inicialmente, testes preliminares com uma única camada oculta foram realizados. Um coeficiente de correlação de 0,917 para as amostras de teste foi obtido, ou seja, para a viscosidade com uma única camada oculta na ANN, enquanto que, com duas camadas ocultas, o coeficiente de teste foi 0,990. Resultados semelhantes foram obtidos para as outras propriedades, o que justifica o uso de duas camadas ocultas nas ANNs do presente trabalho.

A primeira etapa de otimização compara métodos (algoritmos) para ajustar pesos. Os métodos de convergência foram alternados e os restantes parâmetros foram fixados em logística (sigmoide) e tangente hiperbólica como funções de ativação para a primeira camada oculta e segunda camada oculta, respectivamente, e 20 como o número máximo de falhas na condição de parada.

A Tabela 12 apresenta os melhores coeficientes de correlação (R) entre os valores reais e preditos obtidos na comparação de algoritmos para ajustar os pesos para cada propriedade.

O algoritmo BFGS apresentou os melhores coeficientes de correlação de treinamento, validação e teste para a propriedade viscosidade. É importante notar que os métodos Fletcher-Reeves Conjugate Gradient e Levenberg-Marquardt convergiram em menos tempo e atingiram valores próximos ao BFGS. No entanto, como o trabalho não considera o tempo de convergência, uma vez que o processo de desenvolvimento da ANN não acontece constantemente, o critério para a escolha do método ficou restrito aos melhores coeficientes de correlação. Em relação à propriedade número de cetano, este apresentou melhor coeficiente de correlação quando aplicado o algoritmo Resilient. As demais propriedades índice de iodo,

período de indução, massa específica e ponto de entupimento de filtro a frio tiveram melhores coeficientes de correlação quando usado o algoritmo Levenberg-Marquardt.

Na segunda etapa, o teste de condição de parada foi empregado com o objetivo de melhorar a generalização da rede neural e evitar o *overfitting* (treinamento excessivo) através da otimização do número máximo de falhas (o treinamento é interrompido quando o erro de generalização aumenta i vezes a cada k épocas). Cada propriedade utilizou o algoritmo de convergência que atingiu o melhor resultado na primeira etapa, as funções de ativação foram mantidas em logística (primeira camada) e tangente hiperbólica (segunda camada) e o número máximo de falhas foi variado entre 6, 10, 15, 25 e 30.

Os melhores resultados para as três propriedades (viscosidade, índice de iodo e período de indução) foram obtidos com o número máximo de falhas em 20 conforme a Tabela 12, embora o número máximo de 25 tenham atingido resultados equivalentes. As propriedades número de cetano e ponto de entupimento de filtro a frio alcançaram os melhores resultados a partir do número máximo de falhas em 15. Em relação as demais, a propriedade de massa específica conseguiu os melhores resultados somente com um número máximo de falhas em 30.

A última etapa de otimização ocorreu nas funções de ativação, que é a parte não-linear de cada neurônio que restringe a amplitude do intervalo de saída para cada neurônio. Os três principais tipos de funções, mais utilizados em redes neurais, são as funções logística, tangente hiperbólica e linear [86]. Este processo de otimização utiliza o melhor resultado obtido nas etapas anteriores (primeira e segunda). As funções de ativação foram alternadas entre logística e tangente hiperbólica apenas nas camadas ocultas, enquanto a camada de saída empregou apenas a função linear.

As propriedades viscosidade, número de cetano e ponto de entupimento de filtro a frio apresentaram os melhores resultados com a função logística e função tangente hiperbólica para a primeira e a segunda camada ocultas, respectivamente. Por outro lado, o melhor resultado para o índice de iodo foi obtido com a função tangente hiperbólica para a primeira camada oculta e a função logística para a segunda camada oculta. Para o período de indução e massa específica, foi utilizado a função tangente hiperbólica para ambas as camadas ocultas.

Para todos os testes realizados nas três etapas, o número de neurônios nas camadas ocultas variou de 3 a 25. A Tabela 12 mostra resumidamente os melhores resultados obtidos para as seis propriedades em cada etapa final dos testes.

Tabela 12 - Resumo dos resultados obtidos no processo de otimização do método ANN

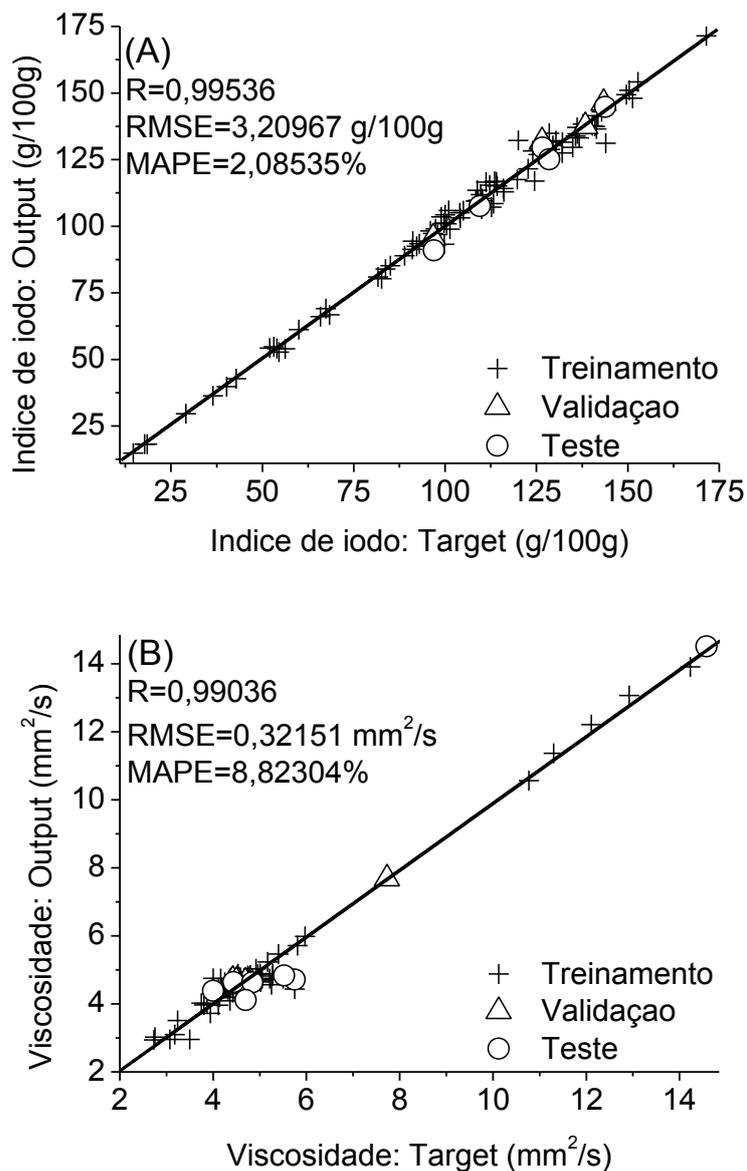
Etapas	Parâmetros	Topologia	Algoritmo	Máximo de falhas na validação	Funções de transferência		Coeficientes (<i>R</i>)		
					1°. camada oculta	2°. camada oculta	Treinamento	Validação	Teste
1°	Viscosidade	13-5-7-1	BFGS	20	Logsig	Tanh	0,99076	0,99425	0,99090
	Índice de iodo	13-12-3-1	LM	20	Logsig	Tanh	0,99368	0,99989	0,98903
	Período de indução	13-25-13-1	LM	20	Logsig	Tanh	0,99779	0,96289	0,98239
	Número de cetano	13-19-10-1	Resilient	20	Logsig	Tanh	0,89779	0,98153	0,95182
	Massa específica	13-7-16-1	LM	20	Logsig	Tanh	0,95579	0,93187	0,82101
	Ponto de entupimento de filtro a frio	13-10-8-1	LM	20	Logsig	Tanh	0,96880	0,98620	0,96030
2°	Viscosidade	13-5-7-1	BFGS	20	Logsig	Tanh	0,99076	0,99425	0,99090
	Índice de iodo	13-12-3-1	LM	20	Logsig	Tanh	0,99368	0,99989	0,98903
	Período de indução	13-25-13-1	LM	20	Logsig	Tanh	0,99779	0,96289	0,98239
	Número de cetano	13-19-10-1	Resilient	15	Logsig	Tanh	0,89266	0,97749	0,96138
	Massa específica	13-5-5-1	LM	30	Logsig	Tanh	0,92896	0,98113	0,86231
	Ponto de entupimento de filtro a frio	13-10-8-1	LM	15	Logsig	Tanh	0,96880	0,98620	0,96030
3°	Viscosidade	13-5-7-1	BFGS	20	Logsig	Tanh	0,99076	0,99425	0,99090
	Índice de iodo	13-24-6-1	LM	20	Tanh	Logsig	0,99557	0,99147	0,99280
	Período de indução	13-21-9-1	LM	20	Tanh	Tanh	0,99212	0,98472	0,98084
	Número de cetano	13-19-10-1	Resilient	15	Logsig	Tanh	0,89266	0,97749	0,96138
	Massa específica	13-3-3-1	LM	30	Tanh	Tanh	0,95224	0,97621	0,95984
	Ponto de entupimento de filtro a frio	13-10-8-1	LM	15	Logsig	Tanh	0,96880	0,98620	0,96030

Fonte: Autoria própria

Para melhor analisar os coeficientes de correlação das seis propriedades, os valores preditos (saída) e os valores reais (alvo) de treinamento, validação e teste obtidos na etapa final da otimização foram representados graficamente conforme as Figuras 10, 11 e 12. As amostras de treinamento, validação e teste foram traçadas no mesmo gráfico, seguido pelo coeficiente de correlação (*R*), a raiz do erro médio quadrático (RMSE, do inglês *Root Mean Squared Error*) e o erro médio percentual absoluto (MAPE, do inglês *Mean Absolute Percentage Error*) calculado para todos os três conjuntos de amostras concatenados, nas Figuras 10, 11 e 12. É importante notar que os coeficientes de correlação mostrados na Tabela 12 representam cada conjunto de

amostras individualmente. As Figuras foram ordenadas pelo melhor coeficiente de correlação e agrupadas a cada duas propriedades.

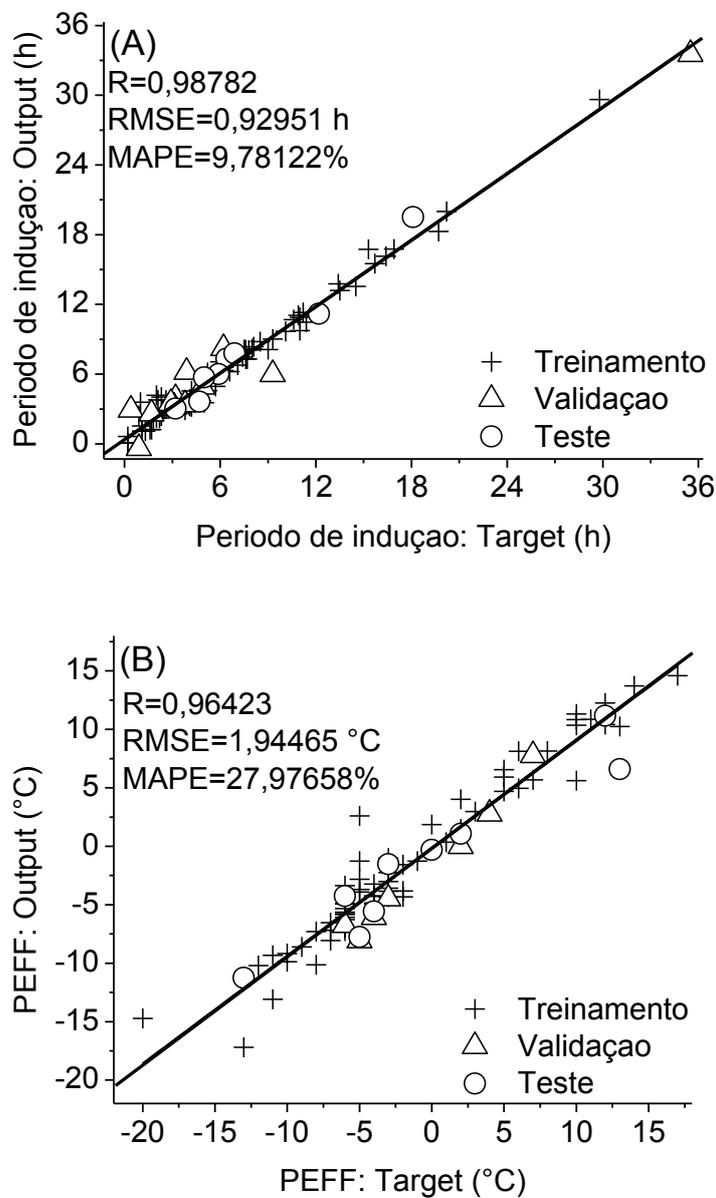
Figura 10 – Gráfico de dispersão dos valores preditos (output) x valores reais (target), R, RMSE e MAPE para o conjunto de amostras de treinamento, validação e teste para as propriedades índice de iodo e viscosidade



Fonte: Autoria própria

Os melhores coeficientes foram obtidos para o índice de iodo e viscosidade, que atingiram R 0,99536 e R 0,99036, respectivamente, e os erros RMSE 3,20967 g/100g e MAPE 2,08535 %, para o índice de iodo, e os erros RMSE 0,32151 mm²/s e MAPE 8,82304 %, para viscosidade.

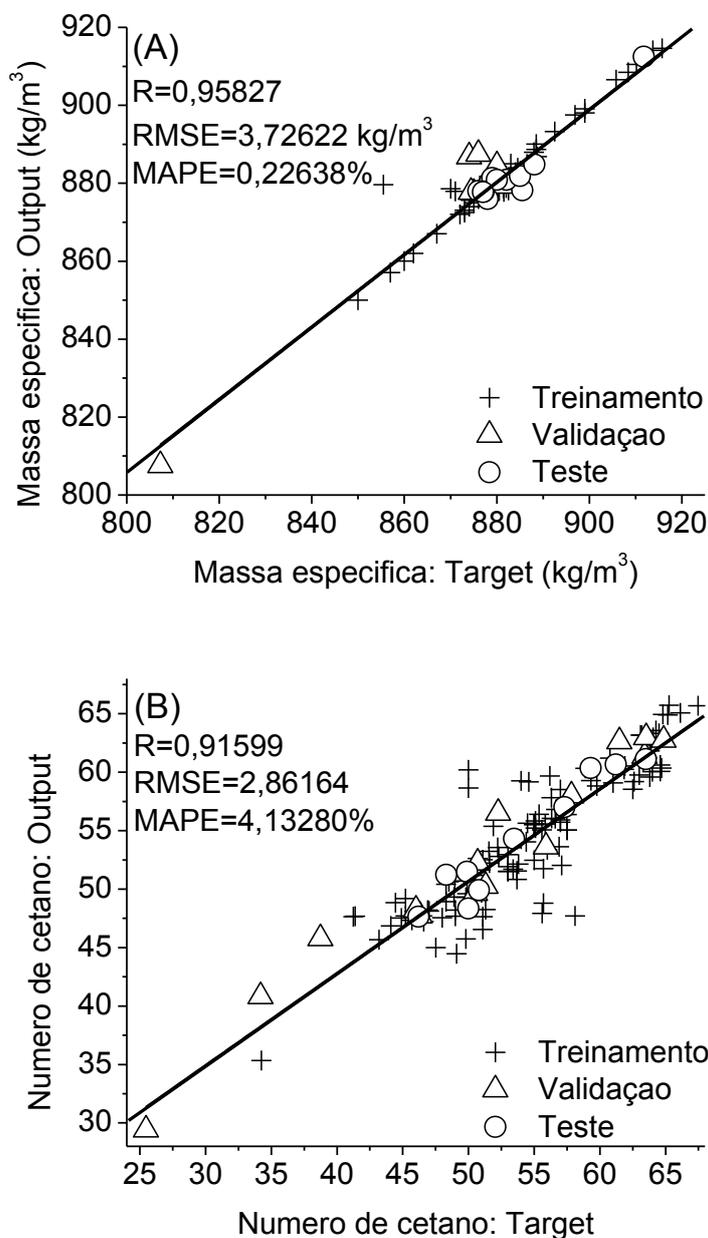
Figura 11 – Gráfico de dispersão dos valores preditos (output) x valores reais (target), R, RMSE e MAPE para o conjunto de amostras de treinamento, validação e teste para as propriedades período de indução e PEFF



Fonte: Autoria própria

Na sequência dos melhores coeficientes obtidos, a propriedade período de indução apresentou o R 0,98782 e a propriedade PEFF apresentou R 0,96423. Os erros para essas propriedades foram RMSE 0,92951 h e RMSE 1,94465 °C, e MAPE 9,78122 % e MAPE 27,97658 %, respectivamente para período de indução e PEFF.

Figura 12 – Gráfico de dispersão dos valores preditos (output) x valores reais (target), R, RMSE e MAPE para o conjunto de amostras de treinamento, validação e teste para as propriedades massa específica e número de cetano



Fonte: Autoria própria

Por fim, os coeficientes obtidos para massa específica e número de cetano foram R 0,95827 e R 0,91599, respectivamente, e os erros RMSE 3,72622 kg/m³ e MAPE 0,22638 %, para a massa específica, e os erros RMSE 2,86164 mm²/s e MAPE 4,13280 %, para número de cetano.

Mesmo que o MSE tenha sido usado como limiar de erro no processo de treinamento da ANN, para apresentação dos resultados o RMSE foi considerado mais adequado para a

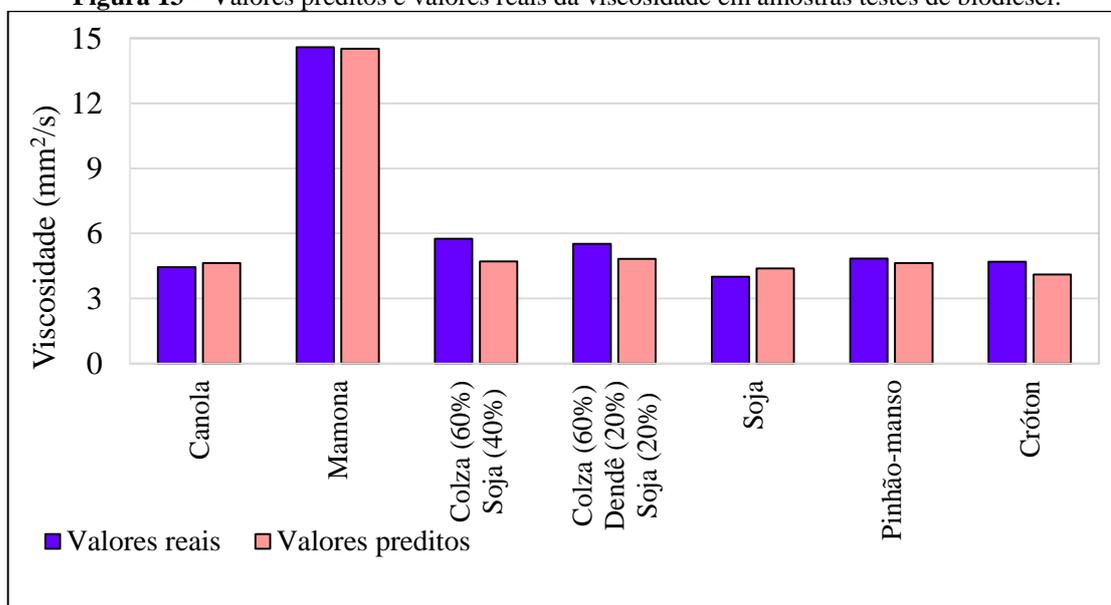
visualização da faixa de variação entre os valores preditos e os valores reais, enquanto o MAPE representa uma medida de precisão dos valores preditos.

Em uma visão geral, a Tabela 12 e as Figuras 10, 11 e 12 apresentaram altos coeficientes de correlação obtidos, tanto no treinamento e validação da rede como também no teste de aplicação para as propriedades estudadas. No processo de desenvolvimento da rede, treinamento e validação ocorreram simultaneamente e foram responsáveis pela obtenção de uma arquitetura com pesos ajustados além de preparar a rede para a aplicação na etapa de teste.

A etapa de teste se resume em aplicar a ANN em um conjunto de amostras que não foram utilizados nos processos de treinamento e validação, ou seja, o processo de teste implica simular uma situação real para a ANN.

Os valores preditos na etapa de teste, por ANN, foram comparados com valores reais obtidos por métodos oficiais para cada propriedade. A Figura 13 mostra os valores de saída e os valores alvos de viscosidade. As amostras de teste foram constituídas de biodiesel a partir de vários tipos de matérias-primas como canola, mamona, soja, pinhão-manso, cróton e misturas de colza, soja e dendê. Os principais FAMES destas amostras foram C16:0, C18:1, C18:2 e C18:1 OH, o RMSE para viscosidade em amostras de teste foram 0,55084 mm²/s.

Figura 13 – Valores preditos e valores reais da viscosidade em amostras testes de biodiesel.

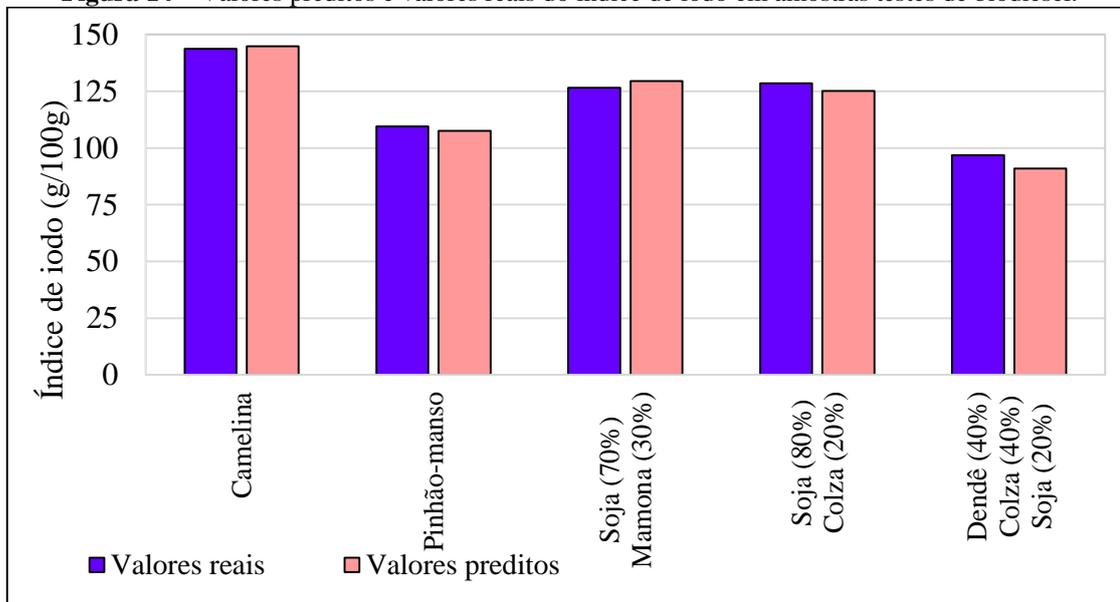


Fonte: Autoria própria

Os valores de saída e alvo do índice de iodo são mostrados na Figura 14. As amostras de teste aplicadas para avaliar o índice de iodo foram biodiesel de camelina, pinhão-manso e misturas de soja, mamona, colza e dendê. Os FAMES presentes em maiores percentuais foram

C16:0, C18:1, C18:2, C18:3 e C18:1 OH, com o RMSE 3,48535 g/100g, um erro baixo que garante um bom desempenho do método desenvolvido para o valor de iodo em uma boa diversidade de ésteres.

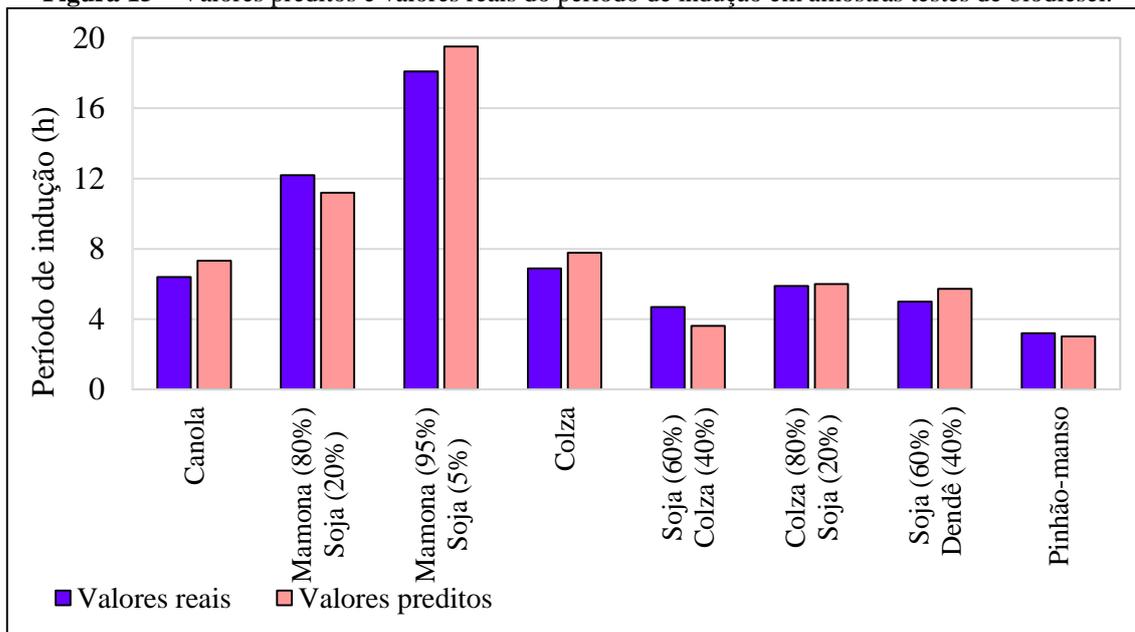
Figura 14 – Valores preditos e valores reais do índice de iodo em amostras testes de biodiesel.



Fonte: Autoria própria

A Figura 15 apresenta os valores preditos pela ANN e os valores reais do período de indução, para as amostras de teste definidas.

Figura 15 – Valores preditos e valores reais do período de indução em amostras testes de biodiesel.

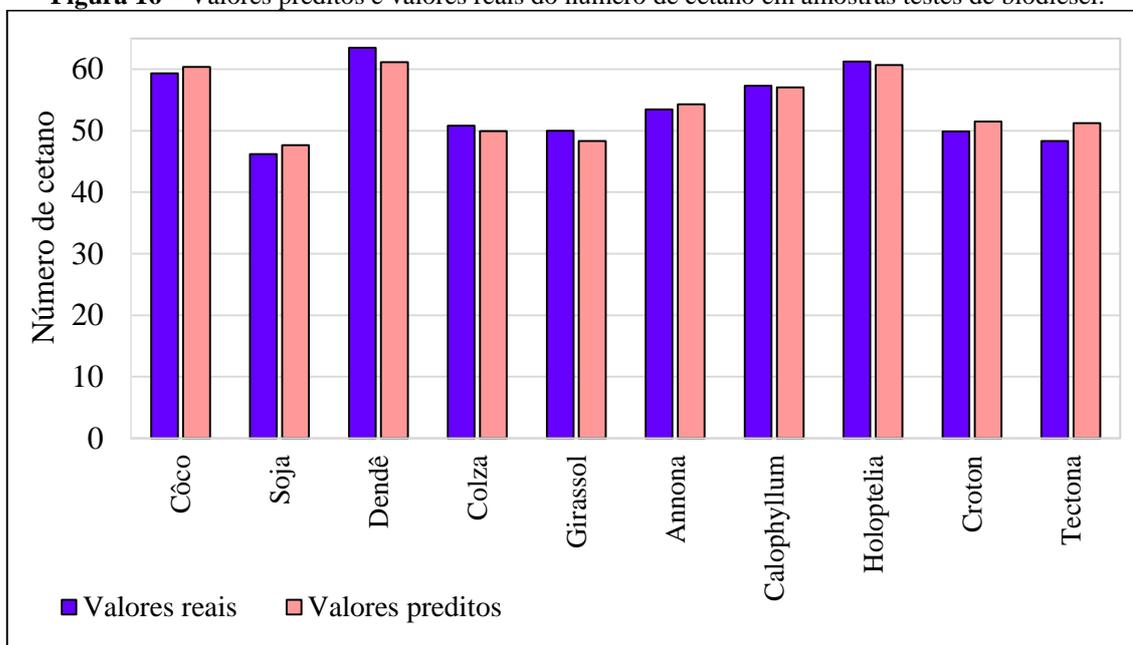


Fonte: Autoria própria

Para o período de indução, as amostras de teste variaram entre canola, sementes de colza, pinhão-mansão e misturas de mamona, soja, sementes de colza e dendê. A disposição da presença de FAMES foi o mesmo que o índice de iodo, tendo C16:0, C18:1, C18:2, C18:3 e C18:1 OH como os principais ésteres, e o RMSE para o período de indução foi 0,89218 h.

Os valores de saída e alvo do número de cetano são comparados na Figura 16. As amostras de teste aplicadas para avaliar o número de cetano foram biodiesel de côco, soja, dendê, colza, girassol, mamona, calophyllum, holoptelia, croton e tectona. Os FAMES presentes em maiores percentuais foram C16:0, C18:0, C18:1 e C18:2, com o RMSE 2,05763 para o número de cetano.

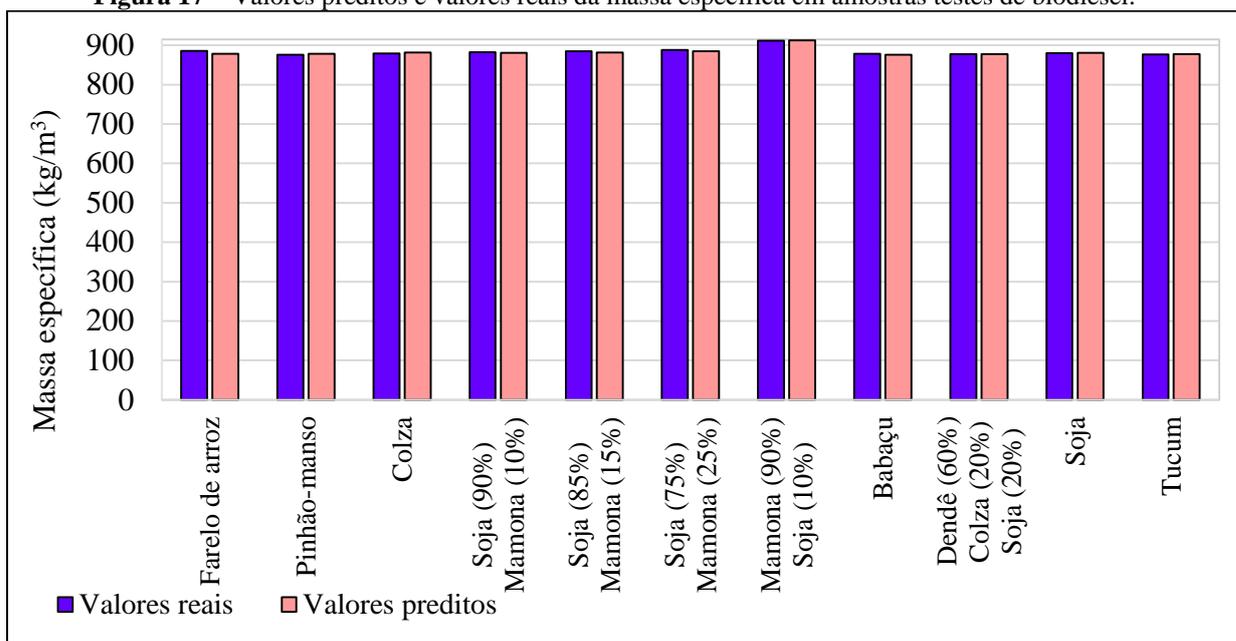
Figura 16 – Valores preditos e valores reais do número de cetano em amostras testes de biodiesel.



Fonte: Autoria própria

A Figura 17 apresenta os valores preditos pela ANN e os valores reais da massa específica, para as amostras de teste definidas.

Figura 17 – Valores preditos e valores reais da massa específica em amostras testes de biodiesel.

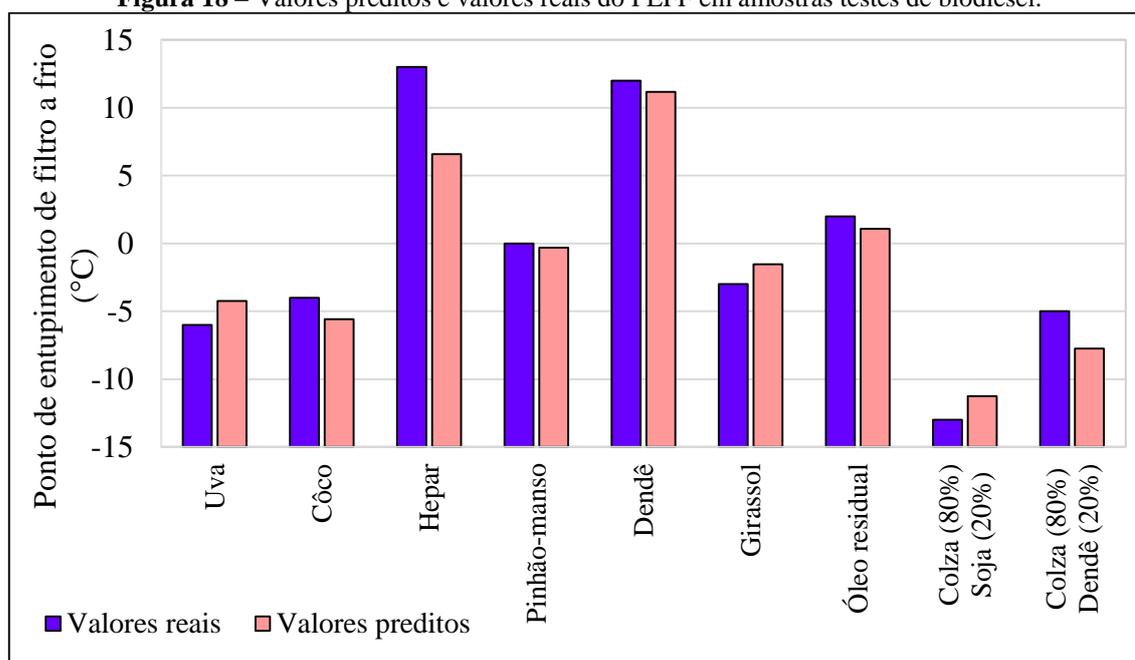


Fonte: Autoria própria

Para a massa específica, as amostras de teste variaram entre biodieseis de farelo de arroz, pinhão-mansão, sementes de colza, babaçu, soja, tucum e misturas de soja, mamona, dendê e sementes de colza. Os FAMES presentes em maiores percentuais foram C12:0, C16:0, C18:1, C18:2 e C18:1 OH como os principais ésteres, e o RMSE para a massa específica foi 2,88615 kg/m³, um excelente desempenho considerando os limites conforme a Figura 17.

A Figura 18 mostra os valores de saída e os valores alvos de PEFF. As amostras de teste foram biodieseis de uva, côco, hepar, pinhão-mansão, dendê, girassol, óleo residual e misturas de sementes de colza, soja e dendê. Os principais FAMES destas amostras foram C12:0, C16:0, C18:0, C18:1 e C18:2, o RMSE para viscosidade em amostras de teste foram 2,60578 °C.

Figura 18 – Valores preditos e valores reais do PEF em amostras testes de biodiesel.



Fonte: Autoria própria

Nos conjuntos de teste, cujas amostras foram aleatoriamente selecionadas pelo método de particionamento *k-fold*, estavam presentes algumas amostras de biodieseis de soja, tucum, babaçu, dendê e pinhão-manso. Essas matrizes, conforme foi discutido no capítulo 2.2, são as oleaginosas mais produzidas no Estado do Maranhão, como a soja, tucum e babaçu, ou com grande potencialidade para o seu desenvolvimento no Estado, como o dendê e o pinhão-manso. Apesar de não estarem presentes no conjunto de teste, os biodieseis de milho e algodão apresentam grande semelhança em termos de composição com algumas amostras de teste, como os biodieseis de soja e pinhão-manso, por exemplo, o que ainda assim possibilita a aplicação das ANNs para essas oleaginosas, uma vez que o trabalho se baseia na composição e não está diretamente ligado a um tipo específico de oleaginosa.

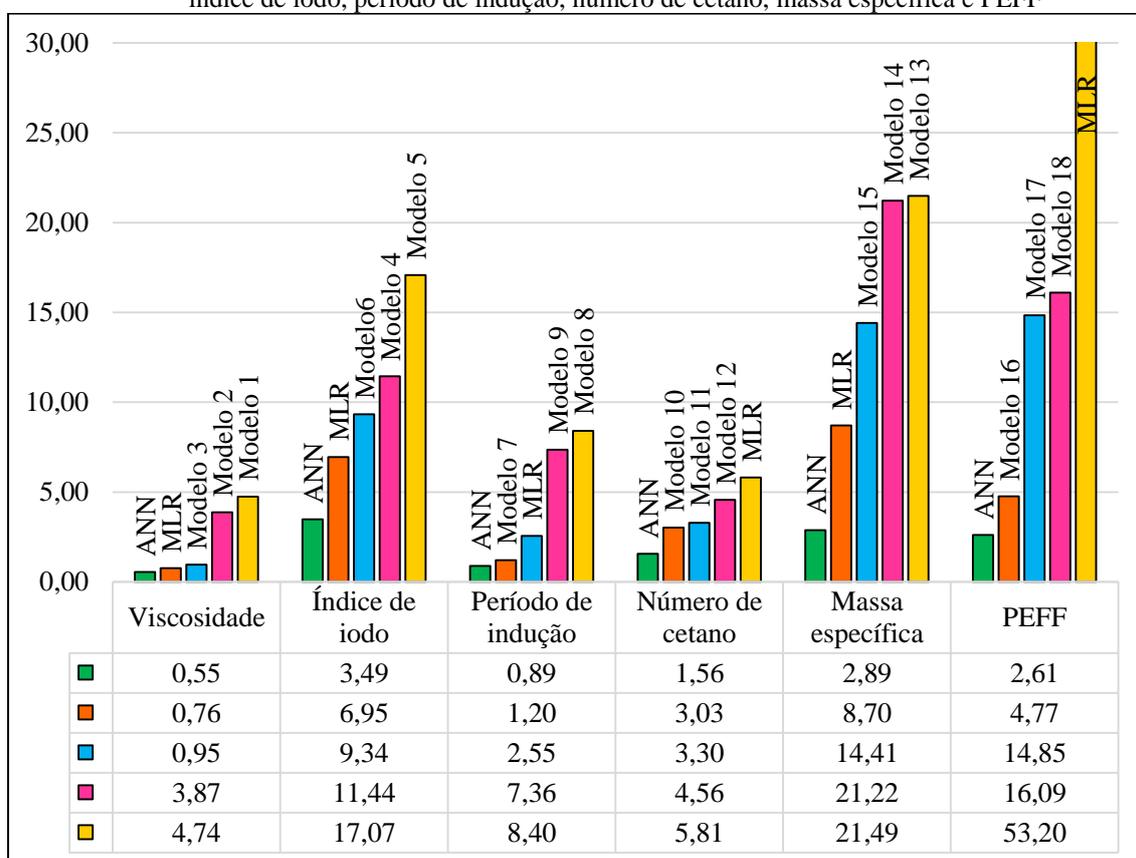
Assim, as ANNs otimizadas se mostraram bastante adequadas para a predição de propriedades físico-químicas de biodieseis, a partir da composição do próprio biodiesel ou do óleo vegetal, o que viabiliza a aplicação dessa ferramenta na predição de propriedades físico-químicas de uma determinada oleaginosa com foco na produção de um biodiesel que atenda às especificações dos parâmetros de qualidade, seja a partir de matrizes do Estado do Maranhão ou de qualquer outra oleaginosa, desde que sua composição majoritária esteja compreendida pelos 13 FAMES utilizados no treinamento das ANNs.

Os resultados de RMSE obtidos pelos modelos de ANNs otimizados neste trabalho foram comparados às equações de MLR desenvolvidas e a outros métodos lineares de predição.

A comparação a modelos de ANNs de trabalhos disponíveis na literatura, assim como outros métodos não-lineares, se tornou inviável devido à falta de acesso ao banco de dados utilizado por eles e à configuração da rede (arquitetura e distribuição de pesos) dos diferentes trabalhos, o que não permitiu nivelar as condições para teste.

A Figura 19 mostra a comparação do RMSE obtido por modelos de ANN e por equações de MLR, desenvolvidos no presente trabalho, e por três métodos lineares da literatura, para cada uma das seis propriedades de biodiesel estudadas.

Figura 19 - Comparação dos RMSEs para o método de ANN e equações de MLR desenvolvidos e métodos lineares da literatura, aplicados nas amostras do conjunto de teste para predição das propriedades viscosidade, índice de iodo, período de indução, número de cetano, massa específica e PEFF



Fonte: Autoria própria

A escolha dos métodos lineares foi baseada na relação direta ou indireta entre as equações e a composição do biodiesel ou matéria-prima. As equações do modelo 1 [127], modelo 2 [128] e modelo 3 [129] para prever viscosidade estavam diretamente relacionadas à composição dos FAMES. O autor do modelo 1, na sua equação, utilizou a quantidade fracional de C18:1, C18:2, C18:3 e C22:1, enquanto que o modelo 2 foi baseado no grau de instauração e na massa molar de cada FAME. A equação usada pelo modelo 3 aplica a quantidade de C16:0, C18:0, C18:1, C18:2, C18:3 e C18:1 OH e viscosidades do seu próprio banco de dados, exceto

pelo C18:1 OH, cuja viscosidade foi calculada baseada na mesma equação e na viscosidade dos outros ésteres.

Figura 13 mostra a presença de um biodiesel de mamona nas amostras do conjunto de teste. A MLR e o modelo 3, que consideram a quantidade de C18:1 OH, apresentaram erros próximos ao erro da ANN, mas esta última teve o menor RMSE. O modelo 2, apesar de usar a massa molar do C18:1 OH, não pondera a presença do grupo hidroxila na molécula, responsável por aumentar significativamente a viscosidade do éster [130]. Isto pode justificar o RMSE do modelo 2 aproximadamente 7 vezes maior que o erro do método de ANNs.

Como o modelo 1 para prever viscosidade não considera a importância de C18:1 OH, o RMSE para este método foi mais de 8 vezes maior que aquele obtido pelo método de ANN. Isso pode ser devido ao éster do ácido ricinoleico, presente no óleo de mamona, ter uma viscosidade muito alta, e mesmo em pequenas quantidades ele pode influenciar significativamente o resultado final da viscosidade.

Para predição do índice de iodo, depois da ANN, a equação de MLR gerou o menor erro entre os métodos lineares. O modelo 4 [131] e o modelo 6 [132] consideraram apenas a quantidade de FAMES insaturados e seus números de duplas ligações, que estão diretamente relacionados ao índice de iodo do biodiesel. A equação do modelo 5 [133] usa o percentual dos três principais FAMES insaturados e dois saturados, que não afetam substancialmente o índice de iodo, o que pode justificar o alto RMSE relacionado aos outros métodos lineares. Contudo, o método de ANN apresentou um RMSE quase 2 vezes menor que o melhor método linear para predição do índice de iodo (MLR).

As equações propostas no modelo 7 [134], modelo 8 [135] e modelo 9 [129] são aplicadas para determinar o período de indução baseado na composição. No primeiro método, mesmo que o modelo 7 tenha sido restrito à quantidade dos FAMES C18:2 e C18:3, os resultados obtidos para as amostras de teste foram os que estavam mais próximos dos resultados obtidos por ANN. Isso pode ser explicado pelo fato de que o número de múltiplas duplas ligações, preferencialmente conjugadas, desempenha um papel importante na estabilidade oxidativa do biodiesel e pode ser mais importante do que simplesmente a quantidade de um FAME com apenas uma única insaturação [136] [137].

A equação de MLR para prever período de indução apresentou um RMSE quase 3 vezes maior que aquele de ANN. Apesar da equação do modelo 8 considerar a soma de todos os FAMES insaturados e o modelo 9 usar a quantidade dos ésteres C16:0, C18:0, C18:1, C18:2

e C18:3 e períodos de indução do seu próprio banco de dados, seus RMSEs foram cerca de 7 e 6 vezes, respectivamente, maiores quando comparados ao modelo 7.

No modelo 9, os autores avaliaram amostras com apenas 5 tipos de matrizes vegetais e 2 tipos de matrizes animais. Essa pequena quantidade de amostras limitou a faixa de aplicação da equação desenvolvida por eles, o que provavelmente explica os altos erros quando aplicada em um banco de dados heterogêneo. Na abordagem do modelo 8, a equação correlaciona o período de indução à quantidade total de FAMEs insaturados, mas ela não diferencia a influência que o número de duplas ligações em cada éster causa no processo de oxidação, o que pode favorecer a obtenção de um resultado insatisfatório.

O modelo de ANN teve o menor RMSE na predição do número de cetano, quase 2 vezes menor que o melhor método linear para essa propriedade, o modelo 10. Entretanto, os métodos lineares para predição do número de cetano, inclusive a equação de MLR, não apresentaram RMSEs consideravelmente distintos entre si. O modelo 10 [113] e o modelo 11 [122] consideraram a influência da quantidade de 7 FAMEs. A equação de MLR, apesar de utilizar 13 FAMEs para prever o número de cetano, apresentou o RMSE mais alto dentre os métodos usados na comparação, inclusive maior que o erro do modelo 12 [123], que corresponde à equação mais simples com apenas duas variáveis de entrada relacionadas ao número de átomos de carbono e às duplas ligações do FAME.

Na predição de massa específica, a ANN apresentou o melhor desempenho em comparação aos outros métodos, com um RMSE 3 vezes menor do que o erro do melhor método linear, a equação de MLR gerada neste trabalho. A MLR, por utilizar uma faixa ampla de FAMEs, apresentou o menor RMSE dos métodos lineares. O modelo 15 [125] também se baseia em uma equação de regressão múltipla, entretanto apresentou RMSE 5 vezes maior que o da ANN. O modelo 13 [116] e o modelo 14 [124], ambos de trabalhos de um mesmo autor, se basearam no peso molecular e número de insaturações de cada éster que compõe o biodiesel, porém o modelo 14 utilizou também a temperatura, o que justifica seu erro um pouco menor que o do modelo 13. Apesar disso, o modelo 14 e 13 apresentaram erros próximos, maiores que 7 vezes o RMSE da ANN.

De um modo geral, todos os métodos utilizados na predição do ponto de entupimento de filtro a frio (PEFF) de biodiesel não apresentaram um desempenho muito bom, considerando-se a faixa normal de variação dessa propriedade que nas amostras do conjunto de teste foi de -13 °C a 13 °C (amplitude igual a 26 °C). O RMSE da ANN foi o menor, seguido do modelo 16 [126], que considerou unicamente o percentual do éster metílico do ácido

palmítico e obteve um RMSE 2 vezes maior que o erro da ANN. O modelo 17 [126] e o modelo 18 [26] consideraram o total de ésteres de ácidos graxos insaturados e obtiveram erros bem próximos, cerca de 6 vezes maiores do que o RMSE da ANN. A equação de MLR gerada neste trabalho apresentou o maior RMSE, correspondente a mais de 200% da amplitude de variação de 26 °C do PEFF nas amostras de teste, o que representa um resultado impraticável.

De um modo geral, o método de ANN obteve os melhores resultados para as seis propriedades: viscosidade, índice de iodo, período de indução, número de cetano, massa específica e PEFF. O processo de treinamento e validação empregou um banco de dados heterogêneo que inclui 13 tipos de FAMES, o que favoreceu uma generalização apropriada das ANNs assim como os bons resultados obtidos em comparação à MLR e aos outros métodos lineares citados no trabalho.

5 CONCLUSÕES

As amostras de biodiesel com 13 tipos de FAME empregadas como insumos foram adequadas para generalizar devidamente as ANNs. Portanto, uma única análise de composição permite prever apropriadamente as propriedades viscosidade, índice de iodo, período de indução, número de cetano, massa específica e PEFF. Os métodos lineares, usados para comparar e validar os resultados obtidos pelos modelos de ANNs desenvolvidos neste trabalho, também usaram o mesmo conjunto de amostras de teste.

Os resultados obtidos pelas ANNs mostraram a viabilidade do método proposto para prever, de forma confiável, a viscosidade, índice de iodo, período de indução, número de cetano, massa específica e PEFF com o RMSE das amostras de teste que simularam amostras reais de 0,55 mm²/s, 3,49 g/100g, 0,89 h, 2,06, 2,89 kg/m³ e 2,61 °C, respectivamente. As equações MLR desenvolvidas e outros métodos lineares da literatura obtiveram resultados impraticáveis para predição dessas propriedades quando aplicadas no mesmo conjunto de amostras para análise, com exceção de MLR e do modelo 3, para predição de viscosidade, e do modelo 7 para a predição do período de indução.

Os melhores resultados obtidos pelo método ANN, quando comparado com as abordagens lineares, indicaram uma tendência não-linear de predição de algumas propriedades de biodiesel. A comparação entre as ANNs desenvolvidas e outros métodos não-lineares tornou-se inviável, uma vez que não foi possível nivelar as condições de teste para aplicação.

O desenvolvimento de sistemas como Oleodata e ProOleo disponibilizaram recursos para compartilhamento de bases de dados sobre a produção de biodiesel e oferecer o acesso a predição das propriedades estudadas via web.

Desse modo, o método proposto apresenta-se como uma alternativa eficiente e de baixo custo em comparação com métodos oficiais para análises e estudos sobre o potencial de matrizes para a produção de biodiesel, por meio das propriedades relacionadas à composição: viscosidade, índice de iodo, período de indução, número de cetano, massa específica e PEFF.

Como etapa futura, se sugere um estudo de métodos alternativos que diminuam os custos de análise e obtenham de forma mais rápida os resultados ~~na aquisição~~ da composição do óleo e biodiesel quando comparados ao método utilizado neste trabalho (cromatografia). Um estudo de ajustes na composição pode se tornar uma interessante solução para a otimização de matérias-primas para a produção de biodiesel que atenda aos padrões de qualidade.

REFERÊNCIAS

1. FERRARI, R. A.; OLIVEIRA, V. D. S.; SCABIO, A. Biodiesel de soja - Taxa de conversão em ésteres etílicos, caracterização físico-química e consumo em gerador de energia. **Química Nova**, 28, n. 1, 2005. 19-23.
2. MOSER, B. R. Influence of extended storage on fuel properties of methyl esters prepared from canola, palm, soybean and sunflower oils. **Renewable Energy**, 36, 2011. 1221-1226.
3. DERMIBAS, A. Political, economic and environmental impacts of biofuels: A review. **Applied Energy**, 86, 2009. S108-S117.
4. JANAUN, J.; ELLIS, N. Perspectives on biodiesel as a sustainable fuel. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, 14, May 2010. 1312-1320.
5. FUKUDA, H.; HONDO, A.; NODA, H. Biodiesel Fuel Production by Transesterification of Oils. **Journal of Bioscience and Bioengineering**, 92, 2001. 405-416.
6. NOGUEIRA JUNIOR, S. Programa Biodiesel: agora é para valer? **Análises e Indicadores do Agronegócio**, 1, n. 10, 2006.
7. SUAREZ, P. A. Z.; MENEGHETTI, S. M. P. 70º Aniversário do biodiesel em 2007: evolução histórica e situação atual no Brasil. **Química Nova**, 30, n. 8, 2007. 2068-2071.
8. RAMOS, M. J. et al. Influence of fatty acid composition of raw materials on biodiesel properties. **Bioresource Technology**, 2009. 261-268.
9. HOEKMAN, S. K. et al. Review of biodiesel composition, properties, and specifications. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, 2012. 143-169.
10. ANP. Resolução ANP nº 45, de 25 de agosto de 2014 - DOU 26.08.2014. **Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis**, 2014. Disponível em: <http://nxt.anp.gov.br/nxt/gateway.dll/leg/resolucoes_anp/2014/agosto/ranp%2045%20-%202014.xml>. Acesso em: 22 outubro 2014.
11. SHAHID, E. M.; JAMAL, Y. Production of biodiesel: A technical review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, 15, 2011. 4732-4745.
12. ANP. Anuário Estatístico Brasileiro do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis 2014. **Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis**, 2014. Disponível em: <<http://www.anp.gov.br>>. Acesso em: 02 Outubro 2014.
13. LÔBO, I. P.; FERREIRA, S. L. C.; DA CRUZ, R. S. Biodiesel: parâmetros de qualidade e métodos analíticos. **Química Nova**, 32, n. 6, 2009. 1596-1608.
14. SCHUCHARDT, U.; SERCHELI, R.; VARGAS, R. M. Transesterification of Vegetable Oils: a Review. **Journal of Brazilian Chemical Society**, 9, n. 1, 1998. 199-210.

15. SILVA, C. C. C. M. et al. Biodiesel production from soybean oil and methanol using hydrotalcites as catalyst. **Fuel Processing Technology**, 91, 2010. 205-210.
16. MONTEIRO, M. R. et al. Critical review on analytical methods for biodiesel characterization. **Talanta**, 77, December 2008. 593-605.
17. BAJPAI, D.; TYAJI, V. A. Biodiesel source, production, composition, properties and its benefits. **J. Oleo Sci.**, 55, n. 10, 2006. 487-502.
18. APPLEWHITE, T. H.; OTHMER, K. **Encyclopedia of Chemical Technology**. New York: John-Wiley & Sons, v. 9, 1980. 785-811 p.
19. GUNSTONE, F. D.; HARWOOD, J. L.; PADLEY, F. B. **Lipid Handbook**. 2. ed. London: Chapman and Hal, 1994.
20. BARABÁS, I.; TODORUȚ, I. A. Biodiesel Quality, Standards and Properties. **Biodiesel-Quality, Emissions and By-Products**, 2011. 3-28.
21. MARQUES, D. B. et al. Recent Developments on Statistical and Neural Network Tools Focusing on Biodiesel Quality. **International Journal of Computer Science and Application**, 3, 2014. 97-110.
22. KNOTHE, G. Dependence of biodiesel fuel properties on the structure of fatty acid alkyl esters. **Fuel Processing Technology**, 86, 2005. 1059-1070.
23. JAHIRUL, M. I. et al. The Use of Artificial Neural Networks for Identifying Sustainable Biodiesel Feedstocks. **Energies**, 6, 2013. 3764-3806.
24. FREIRE, L. M. S. et al. Evaluation of the oxidative stability and flow properties of quaternary mixtures of vegetable oils for biodiesel production. **Fuel**, 95, May 2012. 126-130.
25. SIDIBÉ, S. S. et al. Use of crude filtered vegetable oil as a fuel in diesel engines state of the art: Literature review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, 14, 2010. 2748-2759.
26. PARK, J.-Y. et al. Blending effects of biodiesels on oxidation stability and low temperature flow properties. **Bioresource Technology**, 99, n. 5, 2008. 1196-1203.
27. BOUAID, A.; MARTINEZ, M.; ARACIL, J. Long storage stability of biodiesel from vegetable and used frying oils. **Fuel**, 86, 2007. 2596-2602.
28. DANTAS, M. B. et al. Evaluation of the oxidative stability of corn biodiesel. **Fuel**, 90, 2011. 773-778.
29. SARIN, A. et al. Influence of metal contaminants on oxidation stability of Jatropha biodiesel. **Energy**, 34, 2009. 1271-1275.
30. MCCORMICK, R. L. et al. Several factors affecting the stability of biodiesel in standard accelerated tests. **Fuel Processing Technology**, 88, 2007. 651-657.

31. ECHIM, C.; MAES, J.; DE GREYT, W. Improvement of cold filter plugging point of biodiesel from alternative feedstocks. **Fuel**, 93, 2012. 642-648.
32. VALLADARES, G. S. et al. **Mapeamento da Aptidão Agrícola das Terras do Estado do Maranhão**. 1. ed. Campinas: Embrapa, 2007. 25 p.
33. BALAT, M. Potential alternatives to edible oils for biodiesel production - A review of current work. **Energy Conversion and Management**, 52, 2011. 1479-1492.
34. BERGMANN, J. C. et al. Biodiesel production in Brazil and alternative biomass feedstocks. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, 21, 2013. 411-420.
35. IBGE. **Produção Agrícola Municipal**. Ministério do Planejamento, Orçamento e Gestão - MP. Rio de Janeiro, p. 97. 2011a.
36. PANDEY, V. C. et al. *Jatropha curcas*: A potential biofuel plant for sustainable environmental development. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, 16, 2012. 2870-2883.
37. LU, H. et al. Production of biodiesel from *Jatropha curcas* L. oil. **Computers and Chemical Engineering**, 33, 2009. 1091-1096.
38. IBGE. Banco de Dados Agregados. **Sistema IBGE de Recuperação Automática - SIDRA**, 2011c. Disponível em: <<http://www.sidra.ibge.gov.br>>. Acesso em: 15 Abril 2013.
39. MISSÃO, M. R. Soja: origem, classificação, utilização e uma visão abrangente do mercado. **Maringá Maganement**, 3, n. 1, jan./jun. 2006. 7-15.
40. GARRETT, R. D.; LAMBIN, E. F.; NAYLOR, R. L. Land institutions and supply chain configurations as determinants of soybean planted area and yields in Brazil. **Land Use Policy**, 31, 2013. 385-396.
41. MAPA. **Anuário Estatístico da Agroenergia 2012: Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento**. Brasília, p. 284. 2013.
42. ANP. **Anuário estatístico do petróleo, gás natural e biocombustíveis: 2012**. Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis - ANP. Rio de Janeiro, p. 250. 2012b.
43. BELTRÃO, N. E. D. M.; DE AZEVEDO, D. M. P. **O Agronegócio do Algodão no Brasil**. 2. ed. rev. e ampl. ed. Brasília: Embrapa Informação Tecnológica, v. 1, 2008.
44. AMORIM NETO, M. D. S. et al. Zoneamento agroecológico e definição de época de semeadura do algodoeiro no Brasil. **Revista Brasileira de Agrometeorologia**, Passo Fundo, 9, n. 3, 2001. 422-428. Nº Especial: Zoneamento Agrícola.
45. MACHADO, G. C.; CHAVES, J. B. P.; ANTONIASSI, R. Composição em ácidos graxos e caracterização física e química de óleos hidrogenados de coco babaçu. **Revista Ceres**, 53, n. 308, 2006. 463-470.

46. ALBIERO, D. et al. Proposta de uma máquina para colheita mecanizada de babaçu (*Orbignya phalerata* Mart.) para a agricultura familiar. **Acta Amazonica**, 37, n. 3, 2007. 337-346.
47. PUTTI, F. F.; LUDWIG, R.; RAVAZI, A. S. Análise da viabilidade e rentabilidade do uso do babaçu para a produção do biodiesel. **Periódico Eletrônico Fórum Ambiental da Alta Paulista**, 8, n. 7, 2012. 127-142.
48. PAVLAK, M. C. D. M. et al. Aproveitamento da farinha do mesocarpo do babaçu (*Orbignya martiana*) para obtenção de etanol. **Evidência-Interdisciplinar**, Joaçaba, jan./jun. 2007. 7-24.
49. IBGE. **Produção da Extração Vegetal e da Silvicultura**. Ministério do Planejamento, Orçamento e Gestão - MP. Rio de Janeiro, p. 55. 2011b.
50. OBOH, F. O. J.; ODERINDE, R. A. Analysis of the Pulp and Pulp Oil of the Tucum (*Astrocaryum vulgare* Mart) Fruit. **Food Chemistry**, 30, 1988. 277-287.
51. LIMA, J. R. D. O. et al. Biodiesel of tucum oil, synthesized by methanolic and ethanolic routes. **Fuel**, 87, 2008. 1718-1723.
52. DE OLIVEIRA, M. D. S. P.; COUTURIER, G.; BESERRA, P. Biologia da polinização da palmeira tucumã (*Astrocaryum vulgare* Mart.) em Belém, Pará, Brasil. **Acta Botanica Brasilica**, 17, n. 3, 2003. 343-353.
53. NAE. **Cadernos NAE nº 2: Núcleo de Assuntos Estratégicos da Presidência da República**. Secretaria de Comunicação de Governo e Gestão Estratégica. Brasília. 2005.
54. PERES, J. R. R.; DE FREITAS JUNIOR, E.; GAZZONI, D. L. Biocombustíveis: Uma oportunidade para o agronegócio brasileiro. **Revista de Política Agrícola**, v. 14, n. 1, p. 31-41, Jan./Fev./Mar. 2005.
55. BASTOS, T. X. et al. Zoneamento de riscos climáticos para a cultura do dendezeiro no estado do Pará. **Revista Brasileira de Agrometeorologia**, Passo Fundo, v. 9, n. 3, p. 564-570, 2001. N° Especial: Zoneamento Agrícola.
56. GONZALEZ, W. A. et al. **Biodiesel e óleo vegetal in natura**. Ministério de Minas e Energia - MME. Brasília. 2008. 1ª Edição.
57. MONTES, M. L. **Zoneamento Geoambiental do Estado do Maranhão**. Ministério de Planejamento, Orçamento e Coordenação - MP. Salvador, p. 44. 1997.
58. CONAB. **Relatório de Gestão do Exercício de 2011**. Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento - MAPA. Brasília. 2012.
59. SATURNINO, H. M. et al. Cultura do pinhão-manso (*Jatropha curcas* L.). **Informe Agropecuário**, Belo Horizonte, v. 26, n. 229, p. 44-78, 2005.
60. SARIN, R. et al. *Jatropha*-Palm biodiesel blends: An optimum mix for Asia. **Fuel**, 86, 2007. 1365-1371.

61. RODRIGUES, R. A.; ACCARINI, J. H. **Biocombustíveis no Brasil - Realidades e Perspectivas: Programa Brasileiro de Biodiesel**. Ministério das Relações Exteriores - MRE. [S.l.], p. 159-181. 2007.
62. DANTAS, M. B. et al. Obtenção de Biodiesel através da Transesterificação do Óleo de Milho: Conversão em Ésteres Etílicos e Caracterização Físico-Química. **I Congresso da Rede brasileira de tecnologia de Biodiesel**, Brasília, p. 236-240, 2006.
63. LIMA, J. R. D. O. et al. Biodiesel de babaçu (*Orbignya sp.*) obtido por via etanólica. **Química Nova**, 30, n. 3, 2007. 600-603.
64. LIMA, R. R.; TRASSATO, L. C.; COELHO, V. **O tucumã (*Astrocaryum vulgare Mart.*) principais características e potencialidade agroindustrial**. EMBRAPA. Belém, p. 27. 1986.
65. SANTOS, N. A. et al. Thermo-oxidative stability and cold flow properties of babassu biodiesel by PDSC and TMDSC techniques. **Journal of Thermal Analysis and Calorimetry**, 97, n. 2, 2009. 611-614.
66. BALABIN, R. M.; LOMAKINA, E. I. Support vector machine regression (SVR/LS-SVM) - an alternative to neural networks (ANN) for analytical chemistry? Comparison of nonlinear methods on near infrared (NIR) spectroscopy data. **Analyst**, 136, 2011. 1703-1711.
67. MCCULLOCH, W. S.; PITTS, W. A Logical Calculus of the Ideas Immanent in Nervous Activity. **Bulletin of Mathematical Biophysics**, v. 5, p. 115-133, 1943.
68. HEBB, D. O. **The Organization of Behavior**. New York: Wiley, 1949.
69. ROSENBLATT, F. Perceptron: A Probabilistic Model for Information Storage and Organization in the Brain. **Psychological**, v. 65, n. 6, p. 386-408, 1958.
70. MINSKY, M. L.; PAPERT, S. A. **Perceptrons: An Introduction to Computational Geometry**. Massachusetts: MIT Press, 1969.
71. RUMELHART, D. E.; HILTON, G. E.; WILLIAMS, R. J. Learning Representations by Back-Propagation Error. **Nature**, v. 323, p. 533-536, 1986.
72. CYBENKO, G. Approximation by Superpositions of a Sigmoidal Function. **Mathematics of Control, Signals and Systems**, p. 303-314, 1989.
73. RIEDMILLER, M. Advanced Supervised Learning in Multi-Layer Perceptrons — From Backpropagation to Adaptive Learning Algorithms. **Computer Standards & Interfaces**, v. 16, n. 3, p. 265-278, 1994.
74. RAMADHAS, A. S. et al. Artificial neural networks used for the prediction of the cetane number of biodiesel. **Renewable Energy**, 31, n. 15, December 2006. 2524-2533.
75. FREEMAN, J. A.; SKAPURA, D. M. **Neural Networks Algorithms, Applications, and Programming Techniques**. [S.l.]: Addison-Wesley, 1991.

76. BEALE, R.; JACKSON, T. **Neural Computing: An Introduction**. Bristol: Adam Hilger, 1990.
77. BALABIN, R. M.; LOMAKINA, E. I.; SAFIEVA, R. Z. Neural network (ANN) approach to biodiesel analysis: Analysis of biodiesel density, kinematic viscosity, methanol and water contents using near infrared (NIR) spectroscopy. **Fuel**, v. 90, p. 2007-2015, 2011.
78. JAIN, A. K.; MAO, J.; MOHIUDDIN, K. M. Artificial Neural Networks: A Tutorial. **Computer**, v. 29, n. 3, p. 31-44, 1996.
79. GROOT, C. D.; WIIRTZ, D. 'Plain backpropagation' and advanced optimization algorithms: A comparative study. **Neurocomputing**, v. 6, p. 153-161, 1994.
80. RODRÍGUEZ, R. P. et al. Prediction of the cetane number of biodiesel using artificial neural networks and multiple linear regression. **Energy Conversion and Management**, v. 65, p. 255–261, 2013.
81. AZADEH, A. et al. An integrated artificial neural network and fuzzy clustering algorithm for performance assessment of decision making units. **Applied Mathematics and Computation**, v. 187, p. 584–599, 2007.
82. SHARON, H. et al. Biodiesel production and prediction of engine performance using SIMULINK model of trained neural network. **Fuel**, v. 99, p. 197–203, 2012.
83. SHAHBAZ, K. et al. Prediction of glycerol removal from biodiesel using ammonium and phosphonium based deep eutectic solvents using artificial intelligence techniques. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, 118, 15 August 2012. 193–199.
84. KHATAMIAN, M.; DIVBAND, B.; JODAEI, A. Degradation of 4-nitrophenol (4-NP) using ZnO nanoparticles supported on zeolites and modeling of experimental results by artificial neural networks. **Materials Chemistry and Physics**, 134, 23 January 2012. 31-37.
85. KADKHODAIE-ILKHCHI, A.; REZAEI, M. R.; RAHIMPOUR-BONAB, H. A committee neural network for prediction of normalized oil content from well log data: An example from South Pars Gas Field, Persian Gulf. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, 65, March 2009. 23–32.
86. ÇAY, Y. et al. Prediction of engine performance and exhaust emissions for gasoline and methanol using artificial neural network. **Energy**, v. 50, p. 177–186, 2013.
87. ÖZGÖREN, Y. Ö. et al. Predictive modeling of performance of a helium charged Stirling engine using an artificial neural network. **Energy Conversion and Management**, v. 67, p. 357-368, 2013.
88. MOHAMED ISMAIL, H. et al. Artificial neural networks modelling of engine-out responses for a light-duty diesel engine fuelled with biodiesel blends. **Applied Energy**, v. 92, p. 769-777, 2012.

89. GHOBADIAN, B. et al. Diesel engine performance and exhaust emission analysis using waste cooking biodiesel fuel with an artificial neural network. **Renewable Energy**, v. 34, p. 976-982, 2009.
90. YUSAF, T. F. et al. CNG–diesel engine performance and exhaust emission analysis with the aid of artificial neural network. **Applied Energy**, v. 87, p. 1661–1669, 2010.
91. KARA TOGUN, N.; BAYSEC, S. Prediction of torque and specific fuel consumption of a gasoline engine by using artificial neural networks. **Applied Energy**, v. 87, p. 349-355, 2010.
92. OBODEH, O.; AJUWA, C. I. Evaluation of artificial neural network performance in predicting diesel engine NOx emissions. **Applied Sciences, Engineering and Technology**, v. 3, p. 642–653, 2009.
93. CORTÉS, O.; URQUIZA, G.; HERNÁNDEZ, J. A. Optimization of operating conditions for compressor performance by means of neural network inverse. **Applied Energy**, v. 86, p. 2487–2493, 2009.
94. DAS, D.; KUNDU, M. Identification of Algal Biomass Production with Partial Least Squares & Neural Network. **Chemical Engineering and Applications**, v. 2, p. 288-293, 2011.
95. CÔCCO, L. C.; YAMAMOTO, C. I.; VON MEIEN, O. F. Study of correlations for physicochemical properties of Brazilian gasoline. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, 28 March 2005. 55–63.
96. ANDRADE, J. M.; SÁNCHEZ, M. S.; SARABIA, L. A. Applicability of high-absorbance MIR spectroscopy in industrial quality control of reformed gasolines. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, 15 February 1999. 41–55.
97. RAJENDRA, M.; JENA, P. C.; RAHEMAN, H. Prediction of optimized pretreatment process parameters for biodiesel production using ANN and GA. **Fuel**, May 2009. 868–875.
98. NADAI, D. V. et al. Inference of the biodiesel cetane number by multivariate techniques. **Fuel**, 105, March 2013. 325–330.
99. SALDANA, D. A. et al. Prediction of density and viscosity of biofuel compounds using machine learning methods. **Energy Fuels**, 26, n. 4, March 2012. 416–2426.
100. MENG, X.; JIA, M.; WANG, T. Neural network prediction of biodiesel kinematic viscosity at 313 K. **Fuel**, 121, n. 1, April 2014. 133-140.
101. SAEID, B. et al. Estimation of Vegetable Oil-Based Ethyl Esters Biodiesel Densities Using Artificial Neural Networks. **Journal of Applied Sciences**, 8, n. 17, September 2008. 3005.
102. KUMAR, J.; BANSAL, A. Application of artificial neural network to predict properties of diesel-biodiesel blends. **Journal of Science, Engineering and Technology**, 6, n. 2, November 2010. 98-103.

103. PRZYBYLSKI, R.; ZAMBLAZI, R. C. Predicting oxidative stability of vegetable oils using neural network system and endogenous oil components. **Journal of the American Oil Chemists' Society**, 77, n. 9, 2000. 925-932.
104. BALABIN, R. M.; SAFIEVA, R. Z. Near-Infrared (NIR) Spectroscopy for Biodiesel Analysis: Fractional Composition, Iodine Value, and Cold Filter Plugging Point from One Vibrational Spectrum. **Energy Fuels**, 25, 2011. 2373–2382.
105. CANDEIA, R. A. **Biodiesel de Soja: Síntese, Degradação e Misturas Binárias**. Universidade Federal da Paraíba. João Pessoa. 2008.
106. DANTAS, M. B. **Blendas de Biodiesel: Propriedades de Fluxo, Estabilidade Térmica e Oxidativa e Monitoramento Durante Armazenamento**. UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA. João Pessoa. 2010.
107. KIVEVELE, T. T.; MAKAME, M. M. Experimental Investigations of Oxidation Stability of Biodiesel Produced from Manketti Seeds Oil (*Schinziophyton rautanenii*). **Energy Fuels**, 25, 12 April 2011. 2341–2346.
108. MARTÍN, C. et al. Fractional characterisation of jatropha, neem, moringa, trisperma, castor and candlenut seeds as potential feedstocks for biodiesel production in Cuba. **Biomass & Bioenergy**, 34, 2010. 533-538.
109. NOGUEIRA, C. A. et al. Densities and Viscosities of Binary Mixtures of Babassu Biodiesel + Cotton Seed or Soybean Biodiesel at Different Temperatures. **Journal of Chemical & Engineering Data**, 55, 2010. 5305–5310.
110. PADHI, S. K. **Preparation and Characterization of Biodiesel from Non-Edible oils**. NATIONAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY. ORISSA. 2010.
111. SANTOS, J. R. D. J. **BIODIESEL DE BABAÇU: Avaliação Térmica, Oxidativa e Misturas Binárias**. UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA. JOÃO PESSOA. 2008.
112. SANFORD, S. D.; WHITE, J. M.; SHAH, P. S. Feedstock and Biodiesel Characteristics Report. **Renewable Energy Group**, 2009. Disponível em: <www.regfuel.com>.
113. BAMGBOYE, A. I.; HANSEN, A. C. Prediction of cetane number of biodiesel fuel from the fatty acid methyl ester (FAME) composition. **Int. Agrophysics**, 22, 2008. 21-29.
114. TONG, D. et al. Cetane Number Prediction of Biodiesel from the Composition of the Fatty Acid Methyl Esters. **J Am Oil Chem Soc**, 88, 2011. 415-423.
115. CHEENKACHORN, K. Predicting Properties of Biodiesels Using Statistical Models and Artificial Neural Networks. **Asian Journal on Energy and Environment**, 7, n. 2, 2006. 299-306.
116. RAMÍREZ-VERDUZCO, L. F.; RODRÍGUEZ-RODRÍGUEZ, J. E.; JARAMILLO-JACOB, A. R. Predicting cetane number, kinematic viscosity, density and higher

- heating value of biodiesel from its fatty acid methyl ester composition. **Fuel**, 91, n. 1, 2012. 102-111.
117. HONG, I. K.; JEON, G. S.; LEE, S. B. Prediction of biodiesel fuel properties from fatty acid alkyl ester. **Journal of Industrial and Engineering Chemistry**, 20, 2014. 2348-2353.
118. KNOTHE, G. Structure Indices in FA Chemistry. How Relevant Is the Iodine Value? **J. Am. Oil Chem. Soc.**, 79, n. 9, 2002. 847-854.
119. GOPINATH, A.; PUHAN, S.; NAGARAJAN, G. Theoretical modeling of iodine value and saponification value of biodiesel fuels from their fatty acid composition. **Renewable Energy**, 34, 2009. 1806-1811.
120. WANG, L. B. et al. Influence of fatty acid composition of woody biodiesel plants on the fuel properties. **Journal of Fuel Chemistry and Technology**, 40, n. 4, 2012. 397-404.
121. SARIN, A. et al. Blends of biodiesels synthesized from non-edible and edible oils: Influence on the OS (oxidation stability). **Energy**, 35, 2010. 449-453.
122. GOPINATH, A.; PUHAN, S.; NAGARAJAN, G. Relating the cetane number of biodiesel fuels to their fatty acid composition: a critical study. **Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers Part D Journal of Automobile Engineering**, 223, n. 4, 2009. 565-583.
123. SU, Y.-C.; LIU, Y. A. Selection of Prediction Methods for Thermophysical Properties for Process Modeling and Product Design of Biodiesel Manufacturing. **Ind. Eng. Chem. Res.**, 50, n. 11, 2011. 6809-6836.
124. RAMÍREZ-VERDUZCO, L. F. Density and viscosity of biodiesel as a function of temperature: Empirical models. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, 19, 2013. 652-665.
125. AGARWAL, M.; SINGH, K.; CHAURASIA, S. P. Prediction of Biodiesel Properties from Fatty Acid Composition using Linear Regression and ANN Techniques. **Indian Chemical Engineer**, 52, n. 4, 2010. 347-361.
126. SARIN, A. et al. Blends of Biodiesels Synthesized from Non-edible and Edible Oils: Effects on the Cold Filter Plugging Point. **Energy & fuels**, 24, 2010. 1996-2001.
127. CHEENKACHORN, K. Predicting Properties of Biodiesels Using Statistical Models and Artificial Neural Networks. **Asian Journal on Energy and Environment**, 7, n. 2, 2006. 299-306.
128. RAMÍREZ-VERDUZCO, L. F.; RODRÍGUEZ-RODRÍGUEZ, J. E.; JARAMILLO-JACOB, A. R. Predicting cetane number, kinematic viscosity, density and higher heating value of biodiesel from its fatty acid methyl ester composition. **Fuel**, 91, 2012. 102-111.
129. HONG, I. K.; JEON, G. S.; LEE, S. B. Prediction of biodiesel fuel properties from fatty acid alkyl ester. **Journal of Industrial and Engineering Chemistry**, 20, 2014. 2348-2353.

130. KNOTHE, G.; STEIDLEY, K. R. Kinematic viscosity of biodiesel fuel components and related compounds. Influence of compound structure and comparison to petrodiesel fuel components. **Fuel**, 84, 2005. 1059-1065.
131. KNOTHE, . Structure Indices in FA Chemistry. How Relevant Is the Iodine Value? **JAACS**, 79, n. 9, 2002. 847-854.
132. LI-BING, W. et al. Influence of fatty acid composition of woody biodiesel plants on the fuel properties. **J Fuel Chem Technol**, 40, 2012. 397-404.
133. GOPINATH, A.; PUHAN, S.; NAGARAJAN, G. Theoretical modeling of iodine value and saponification value of biodiesel fuels from their fatty acid composition. **Renewable Energy**, 34, 2009. 1806-1811.
134. PARK, J.-Y. et al. Blending effects of biodiesels on oxidation stability and low temperature flow properties. **Bioresource Technology**, 99, 2008. 1196-1203.
135. SARIN, A. et al. Blends of biodiesels synthesized from non-edible and edible oils: Influence on the OS (oxidation stability). **Energy**, 35, 2010. 3449-3453.
136. FOCKE, W. W. et al. The effect of synthetic antioxidants on the oxidative stability of biodiesel. **Fuel**, 94, 2012. 227-233.
137. YAAKOB, Z. et al. A review on the oxidation stability of biodiesel. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, 35, 2014. 136-153.

APÊNDICES

APÊNDICE A

Artigos publicados / aceitos

APPLICATION OF ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS TO PREDICT VISCOSITY, IODINE VALUE AND INDUCTION PERIOD OF BIODIESEL FOCUSED ON THE STUDY OF OXIDATIVE STABILITY

Alex Oliveira Barradas Filho, Allan Kardec Duailibe Barros, Sofiane Labidi, Isabelle Moraes Amorim Viegas, Delano Brandes Marques, Alexandre Ricardo Soares Romariz, Raquel Machado Sousa, Edmar Pereira Marques e Aldaléa Lopes Brandes Marques.
Fuel (Guildford), 2015.

RECENT DEVELOPMENTS ON STATISTICAL AND NEURAL NETWORK TOOLS FOCUSING ON BIODIESEL QUALITY

Delano Brandes Marques, Alex Oliveira Barradas Filho, Alexandre Ricardo Soares Romariz, Isabelle Moraes Amorim Viegas, Djavania Azevêdo da Luz, Allan Kardec Duailibe Barros Filho, Sofiane Labidi e Antonio Sergio Ferraudo
International Journal of Computer Science and Application, v. 3, p. 97, 2014.

AVALIAÇÃO DE MÉTODOS DE CONVERGÊNCIA NO TREINAMENTO DE REDES NEURAS ARTIFICIAIS APLICADAS À PREDIÇÃO DE ÍNDICE DE IODO, VISCOSIDADE E DENSIDADE EM BIODIESEL

Isabelle Moraes Amorim Viegas, Alex Oliveira Barradas Filho, Delano Brandes Marques, Sofiane Labidi, Aldaléa Lopes Brandes Marques, Edmar Pereira Marques e Allan Kardec Duailibe Barros Filho
Cadernos de Pesquisa, v. 21, p. 1-12, 2014.

Premiação

Aplicação de Redes Neurais Artificiais para Avaliação do Potencial de Matrizes Vegetais do Estado do Maranhão para a Produção de Biodiesel

2º Lugar na categoria Apresentação Pôster da Área de Ciências Exatas no I Encontro de Pós-Graduação (2014), Universidade Federal do Maranhão

**Trabalhos apresentados/aprovados
(Trabalhos completos e Resumos expandidos)**

Avaliação dos métodos de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS), de Gradiente Descendente e de Gradiente Conjugado no treinamento de redes neurais aplicado à predição de índice de iodo em biodiesel

7º Congresso Brasileiro de Pesquisa e Desenvolvimento em Petróleo e Gás 7º PDPETRO, 2013, Aracajú-SE. 7º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo e Gás, 2013

Estudo voltamétrico sobre a estabilidade oxidativa de biodiesel com o auxílio de redes neurais artificiais (RNAs)

7º Congresso Brasileiro de Pesquisa e Desenvolvimento em Petróleo e Gás 7º PDPETRO, 2013, Aracajú-SE. 7º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo e Gás, 2013

Aplicação de redes neurais pelo método de Broyden Fletcher Goldfarb Shanno (BFGS) para predição de parâmetros de qualidade de biodiesel

7º Congresso Brasileiro de Pesquisa e Desenvolvimento em Petróleo e Gás 7º PDPETRO, 2013, Aracajú-SE. 7º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo e Gás, 2013

A Comparison Between Optimization Heuristics of the Best Path Problem Applied to S-Route.

GEOProcessing 2013, The Fifth International Conference on Advanced Geographic Information Systems, Applications, and Services, 2013, Nice. GEOProcessing 2013, The Fifth International Conference on Advanced Geographic Information Systems, Applications, and Services, 2013. p. 172-177

Aplicação de Redes Neurais Artificiais na predição da viscosidade de biodiesel e no estudo da influência da composição nessa propriedade

65ª Reunião Anual da SBPC, 2013, Recife-PE. Anais da 65ª Reunião Anual da SBPC, 2013. v. Único

Redes Neurais Artificiais na predição de massa específica em etanol combustível pelo método BFGS

17º Encontro Nacional de Química Analítica 17º ENQA, 2013, Belo Horizonte-MG. Anais do
17º Encontro Nacional de Química Analítica, 2013

APÊNDICE B

Amostras / Viscosidade

Amostras	C8:0	C10:0	C12:0	C14:0	C16:0	C18:0	C18:1	C18:2	C18:3	C18:1 OH	C20:0	C20:1	C22:1	Viscosidade
A1	0	0	0	0,6	6,9	3	75,2	12,4	1,2	0	0,4	0	0	4,52
A2	0,5	3,8	48,8	17,2	6,9	4	14,2	1,8	0	0	0	0	0	3,24
A3	0	0	0,2	2,9	24,3	22,8	40,2	3,3	0,7	0	0,2	0,6	0	4,82
A4	0	0	0	0	9,3	3,8	17,1	38,7	26,1	0	0	0	0	4,08
A5	0	0	0	0	5	2,2	17,7	18	37,9	0	1,7	9,8	0	4,36
A6	0	0	0	0	3,8	1,9	63,9	19	9,7	0	0,6	0	0	4,44
A7	0	0	0	0	0,9	1,1	3,1	4	0,6	90,3	0	0	0	15,25
A8	6,3	6	49,2	18,5	9,1	2,7	6,5	1,7	0	0	0	0	0	2,73
A9	0	0	0	0	11	3,4	70	12,7	0,8	0	0,6	0,1	0	4,85
A10	0	0	0	0	12,1	1,8	27,2	56,2	1,3	0	0,4	0	0	4,38
A11	0	0	0	0	6	1,8	6,6	76,3	9	0	0,3	0	0	4,11
A12	0	0	0	0	5,2	2,4	13,1	57,1	20	0	0,7	0	0	3,87
A13	0	0	0	0	12,7	5,5	39,1	41,6	0,2	0	0,2	0	0	4,25
A14	0	0	0	0	4,4	3,8	20,7	15,9	54,6	0	0,2	0	0	3,75
A15	0	0	0	0	5,5	5,8	76,3	0,7	0	0	3,1	2	0	5,01
A16	0	0	0	0	14,9	20,6	43,9	17,9	0,4	0	1,6	0	0	5,21
A17	0	0	0	0	5,3	2,2	16,6	13,7	62,1	0	0	0	0	3,94
A18	0	0	0,1	1	19,6	7,5	36,8	28,4	2	0	0,1	0	0	4,50
A19	0	0	0	0,3	12,5	2,1	47,5	35,4	1,1	0	0,6	0	0	4,96
A20	0	0	0	0	9,4	4,1	22	55,3	8,9	0	0	0	0	4,04
A21	0	0	0	0	4,2	3,3	63,6	27,6	0,2	0	0	0	0	4,44
A22	0	0	0,1	0,1	11,8	4,4	25,3	49,5	7,1	0	0,3	0	0	4,33
A23	0	0	0,1	0,5	14,3	8	35,6	35	4	0	0,3	0	0	4,55
A24	0	0	0,4	2,7	6,1	2,8	16,8	17	35,6	0	1,4	14,4	0	3,80
A25	0	0,1	0	0	4,2	2	60,4	21,2	9,6	0	0,7	1,5	0	4,38
A26	6,8	5,4	47,7	18,5	9,1	2,7	6,8	2,1	0,1	0	0,1	0	0	2,75
A27	0	0	0	0	11,5	1,9	26,6	58,7	0,6	0	0,3	0,1	0	4,19
A28	0	0	0,1	0,3	14,9	6,1	40,4	36,2	0,3	0	0,2	0,1	0	4,75
A29	0,8	0,5	0,3	1,1	42,1	4,2	40,8	9,5	0,3	0	0,3	0,1	0	4,61
A30	0	0,6	0,1	0	4,2	1,6	59,5	21,5	8,4	0	0,4	2,1	0	4,50
A31	0	0	0	0,1	8,2	2,5	14,2	74,3	0,1	0	0,1	0	0	4,14
A32	0	0	0,1	0,1	11,6	3,9	23,7	53,8	5,9	0	0,3	0,3	0	4,26
A33	0	0	0,1	0,1	6,4	3,6	21,6	66,2	1,5	0	0,3	0,2	0	4,42
A34	0	0,1	0,2	2,6	24,3	18,2	42,2	4,4	0,9	0	0,2	0,6	0	4,69
A35	0	0	0,2	0,8	16,5	7,1	44,6	25,1	1,1	0	0,3	0,5	0	4,80
A36	0	0	0	0,1	5	2	63,1	19,8	7,2	0	0,6	0	0	4,42
A37	0	0	0,3	1,2	44,1	4,1	39,1	10	0,2	0	0,3	0	0	4,58
A38	0	0	0	0,1	11,7	3,8	23,4	52,6	7,7	0	0,2	0	0	4,12
A39	0	0	0	0,1	4,7	3,9	81,7	7,7	0,3	0	0,3	0	0	4,74

A40	0	0	0	0	13,64	5,67	27,24	42,45	7,13	0	0,6	0	0	4,50
A41	0	0	0	0	12,9	5,33	25,86	40,64	6,72	5,15	0,55	0	0	4,74
A42	0	0	0	0	12,29	5,1	24,76	38,78	6,39	9,44	0,53	0	0	4,92
A43	0	0	0	0	11,68	4,88	23,65	36,92	6,06	13,73	0,5	0	0	5,17
A44	0	0	0	0	11,07	4,65	22,53	35,06	5,73	18,02	0,47	0	0	5,40
A45	0	0	0	0	10,46	4,42	21,42	33,21	5,4	22,32	0,44	0	0	5,81
A46	0	0	0	0	9,85	4,2	20,3	31,35	5,07	26,61	0,41	0	0	5,97
A47	0	0	0	0	7,14	3,06	15,35	24	3,58	45,49	0,27	0	0	7,73
A48	0	0	0	0	4,36	2,17	10,3	14,63	2,11	65,23	0,14	0	0	10,77
A49	0	0	0	0	3,75	1,95	9,19	12,77	1,78	69,52	0,11	0	0	11,30
A50	0	0	0	0	3,14	1,72	8,07	10,91	1,45	73,82	0,08	0	0	12,11
A51	0	0	0	0	2,53	1,49	6,96	9,05	1,12	78,11	0,05	0	0	12,92
A52	0	0	0	0	1,92	1,27	5,85	7,19	0,79	82,4	0,02	0	0	14,23
A53	0	0	0	0	1,44	1,16	4,99	5,29	0,55	85,83	0	0	0	14,58
A54	6,8	6,3	41	16,2	9,4	3,4	14,2	2,5	0	0	0	0	0	3,07
A55	6,8	6,3	41	16,2	9,4	3,4	14,2	2,5	0	0	0	0	0	3,50
A56	0	0	0	0,99	40,1	4,09	43,02	11,04	0,2	0	0,32	0	0	4,58
A57	0	0	0	0,05	4,44	1,67	62,4	19,73	9,47	0	0,56	0	0	4,50
A58	0	0	0	0,07	10,95	4,31	23,12	53,27	6,77	0	0,27	0	0	5,75
A59	0	0	0	0,07	9,65	3,78	30,98	46,56	7,31	0	0,33	0	0	4,58
A60	0	0	0	0,06	8,35	3,25	38,83	39,85	7,85	0	0,39	0	0	4,50
A61	0	0	0	0,06	7,04	2,73	46,69	33,15	8,39	0	0,44	0	0	5,75
A62	0	0	0	0,05	5,74	2,20	54,54	26,44	8,93	0	0,50	0	0	5,50
A63	0	0	0	0,25	16,78	4,27	27,10	44,82	5,46	0	0,28	0	0	5,25
A64	0	0	0	0,25	15,48	3,74	34,96	38,12	6,00	0	0,34	0	0	5,00
A65	0	0	0	0,25	14,18	3,21	42,81	31,41	6,54	0	0,40	0	0	4,75
A66	0	0	0	0,24	12,87	2,68	50,67	24,70	7,08	0	0,45	0	0	5,52
A67	0	0	0	0,24	11,57	2,15	58,52	17,99	7,62	0	0,51	0	0	5,27
A68	0	0	0	0,44	22,61	4,22	31,08	36,38	4,14	0	0,29	0	0	5,02
A69	0	0	0	0,43	21,31	3,69	38,94	29,67	4,68	0	0,35	0	0	4,77
A70	0	0	0	0,43	20,01	3,17	46,79	22,96	5,22	0	0,41	0	0	4,52
A71	0	0	0	0,43	18,70	2,64	54,65	16,25	5,76	0	0,46	0	0	5,28
A72	0	0	0	0,62	28,44	4,18	35,06	27,93	2,83	0	0,30	0	0	5,03
A73	0	0	0	0,62	27,14	3,65	42,92	21,22	3,37	0	0,36	0	0	4,78
A74	0	0	0	0,61	25,84	3,12	50,77	14,52	3,91	0	0,42	0	0	4,53
A75	0	0	0	0,81	34,27	4,13	39,04	19,49	1,51	0	0,31	0	0	5,05
A76	0	0	0	0,80	32,97	3,61	46,90	12,78	2,05	0	0,37	0	0	4,80
A77	0	0	0	0,08	13,32	4,81	24,54	55,39	0,74	0	0,42	0	0	4,55
A78	0	0	0	0,09	16,08	5,82	25,46	50,09	0,99	0	0,52	0	0	4,81
A79	0	0	0	0	6,4	2,9	17,7	72,9	0	0	0	0	0	4,56
A80	0	0	0	0	11,9	4,1	23,2	54,2	6,3	0	0	0	0	4,00
A81	0	0	0	0	42,6	4,4	40,5	10,1	0,2	0	0	0	0	4,42
A82	0	0	0	0	2,6	1,2	20,6	20,6	13,3	0	0,9	10,7	25,6	4,71
A83	0	0	0	0	28,3	0,9	13,3	57,5	0	0	0	0	0	4,32
A84	0	0	0	0	14,2	7	44,7	32,8	0,2	0	0	0	0	4,84
A85	0	0	0	0	22,1	21	44	11,3	0	0	1,6	0	0	4,00

A86	0	0	0	0	10,6	6,8	49,4	19	0	0	4,1	2,4	0	4,66
A87	0	0	0	0	9,3	6,3	18,8	42,8	22,4	0	0,3	0	0	4,43
A88	0	0	0	0	5,2	3,9	11,8	71,6	6,9	0	0	0	0	4,70
A89	0	5,1	28,11	25,56	15,41	5,03	20,79	0	0	0	0	0	0	3,18
A90	0	0	0	0	11,29	3,96	19,98	58,39	5,86	0	0	0	0	4,67
A91	0	0	0	0,62	24,09	2,56	15,74	56,99	0	0	0	0	0	3,99
A92	0	0	0	0	14,2	6,9	43,1	34,4	0	0	0	0	0	4,40
A93	0	0	0	0	9,8	6,2	72,2	11,8	0	0	0	0	0	4,16
A94	0	0	0,5	0,2	4,8	5,7	20,6	66,2	0,8	0	0,4	0	0	4,10
A95	0	0	0	0,1	11	4	23,4	53,2	7,8	0	0,3	0	0,1	4,00
A96	0	0	0	0	40,3	3,1	43,4	13,2	0	0	0	0	0	4,50
A97	1,94	2,12	52,51	25,04	7,46	0,45	8,39	2,09	0	0	0	0	0	4,54
A98	0	0	0	0	8	2,1	22,6	38,1	28,1	0	0	0	0	4,12

APÊNDICE C

Amostras / Índice de iodo

Amostras	C8:0	C10:0	C12:0	C14:0	C16:0	C18:0	C18:1	C18:2	C18:3	C18:1 OH	C20:0	C20:1	C22:1	Índice de iodo
A1	0	0	0	0,6	6,9	3	75,2	12,4	1,2	0	0,4	0	0	92,90
A2	0,5	3,8	48,8	17,2	6,9	4	14,2	1,8	0	0	0	0	0	29,10
A3	0	0	0,2	2,9	24,3	22,8	40,2	3,3	0,7	0	0,2	0,6	0	40,20
A4	0	0	0	0	9,3	3,8	17,1	38,7	26,1	0	0	0	0	109,70
A5	0	0	0	0	5	2,2	17,7	18	37,9	0	1,7	9,8	0	143,80
A6	0	0	0	0	3,8	1,9	63,9	19	9,7	0	0,6	0	0	113,50
A7	0	0	0	0	0,9	1,1	3,1	4	0,6	90,3	0	0	0	99,80
A8	6,3	6	49,2	18,5	9,1	2,7	6,5	1,7	0	0	0	0	0	17,80
A9	0	0	0	0	11	3,4	70	12,7	0,8	0	0,6	0,1	0	122,70
A10	0	0	0	0	12,1	1,8	27,2	56,2	1,3	0	0,4	0	0	100,00
A11	0	0	0	0	6	1,8	6,6	76,3	9	0	0,3	0	0	143,40
A12	0	0	0	0	5,2	2,4	13,1	57,1	20	0	0,7	0	0	141,80
A13	0	0	0	0	12,7	5,5	39,1	41,6	0,2	0	0,2	0	0	115,90
A14	0	0	0	0	4,4	3,8	20,7	15,9	54,6	0	0,2	0	0	142,80
A15	0	0	0	0	5,5	5,8	76,3	0,7	0	0	3,1	2	0	110,00
A16	0	0	0	0	14,9	20,6	43,9	17,9	0,4	0	1,6	0	0	132,10
A17	0	0	0	0	5,3	2,2	16,6	13,7	62,1	0	0	0	0	171,50
A18	0	0	0,1	1	19,6	7,5	36,8	28,4	2	0	0,1	0	0	92,20
A19	0	0	0	0,3	12,5	2,1	47,5	35,4	1,1	0	0,6	0	0	112,70
A20	0	0	0	0	9,4	4,1	22	55,3	8,9	0	0	0	0	128,50
A21	0	0	0	0	4,2	3,3	63,6	27,6	0,2	0	0	0	0	108,60
A22	0	0	0,1	0,1	11,8	4,4	25,3	49,5	7,1	0	0,3	0	0	128,70
A23	0	0	0,1	0,5	14,3	8	35,6	35	4	0	0,3	0	0	99,70
A24	0	0	0,4	2,7	6,1	2,8	16,8	17	35,6	0	1,4	14,4	0	152,80
A25	0	0,1	0	0	4,2	2	60,4	21,2	9,6	0	0,7	1,5	0	108,80
A26	6,8	5,4	47,7	18,5	9,1	2,7	6,8	2,1	0,1	0	0,1	0	0	18,50
A27	0	0	0	0	11,5	1,9	26,6	58,7	0,6	0	0,3	0,1	0	101,00
A28	0	0	0,1	0,3	14,9	6,1	40,4	36,2	0,3	0	0,2	0,1	0	109,50
A29	0,8	0,5	0,3	1,1	42,1	4,2	40,8	9,5	0,3	0	0,3	0,1	0	54,00
A30	0	0,6	0,1	0	4,2	1,6	59,5	21,5	8,4	0	0,4	2,1	0	116,10
A31	0	0	0	0,1	8,2	2,5	14,2	74,3	0,1	0	0,1	0	0	141,00
A32	0	0	0,1	0,1	11,6	3,9	23,7	53,8	5,9	0	0,3	0,3	0	125,50
A33	0	0	0,1	0,1	6,4	3,6	21,6	66,2	1,5	0	0,3	0,2	0	128,70
A34	0	0,1	0,2	2,6	24,3	18,2	42,2	4,4	0,9	0	0,2	0,6	0	65,90
A35	0	0	0,2	0,8	16,5	7,1	44,6	25,1	1,1	0	0,3	0,5	0	88,90
A36	0	0	0	0,1	5	2	63,1	19,8	7,2	0	0,6	0	0	109,00
A37	0	0	0,3	1,2	44,1	4,1	39,1	10	0,2	0	0,3	0	0	52,00
A38	0	0	0	0,1	11,7	3,8	23,4	52,6	7,7	0	0,2	0	0	132,00
A39	0	0	0	0,1	4,7	3,9	81,7	7,7	0,3	0	0,3	0	0	85,00

A40	0	0	0	0	13,64	5,67	27,24	42,45	7,13	0	0,6	0	0	143,95
A41	0	0	0	0	12,9	5,33	25,86	40,64	6,72	5,15	0,55	0	0	141,40
A42	0	0	0	0	12,29	5,1	24,76	38,78	6,39	9,44	0,53	0	0	137,68
A43	0	0	0	0	11,68	4,88	23,65	36,92	6,06	13,73	0,5	0	0	136,14
A44	0	0	0	0	11,07	4,65	22,53	35,06	5,73	18,02	0,47	0	0	136,17
A45	0	0	0	0	10,46	4,42	21,42	33,21	5,4	22,32	0,44	0	0	130,35
A46	0	0	0	0	9,85	4,2	20,3	31,35	5,07	26,61	0,41	0	0	126,63
A47	0	0	0	0	7,14	3,06	15,35	24	3,58	45,49	0,27	0	0	119,72
A48	0	0	0	0	4,36	2,17	10,3	14,63	2,11	65,23	0,14	0	0	104,16
A49	0	0	0	0	3,75	1,95	9,19	12,77	1,78	69,52	0,11	0	0	100,39
A50	0	0	0	0	3,14	1,72	8,07	10,91	1,45	73,82	0,08	0	0	97,40
A51	0	0	0	0	2,53	1,49	6,96	9,05	1,12	78,11	0,05	0	0	96,66
A52	0	0	0	0	1,92	1,27	5,85	7,19	0,79	82,4	0,02	0	0	96,74
A53	0	0	0	0	1,44	1,16	4,99	5,29	0,55	85,83	0	0	0	91,14
A54	6,8	6,3	41	16,2	9,4	3,4	14,2	2,5	0	0	0	0	0	42,80
A55	6,8	6,3	41	16,2	9,4	3,4	14,2	2,5	0	0	0	0	0	42,80
A56	0	0	0	0,99	40,1	4,09	43,02	11,04	0,2	0	0,32	0	0	53,10
A57	0	0	0	0,05	4,44	1,67	62,4	19,73	9,47	0	0,56	0	0	124,50
A58	0	0	0	0,07	10,95	4,31	23,12	53,27	6,77	0	0,27	0	0	129,50
A59	0	0	0	0,07	9,65	3,78	30,98	46,56	7,31	0	0,33	0	0	128,50
A60	0	0	0	0,06	8,35	3,25	38,83	39,85	7,85	0	0,39	0	0	127,50
A61	0	0	0	0,06	7,04	2,73	46,69	33,15	8,39	0	0,44	0	0	126,50
A62	0	0	0	0,05	5,74	2,20	54,54	26,44	8,93	0	0,50	0	0	125,50
A63	0	0	0	0,25	16,78	4,27	27,10	44,82	5,46	0	0,28	0	0	114,22
A64	0	0	0	0,25	15,48	3,74	34,96	38,12	6,00	0	0,34	0	0	113,22
A65	0	0	0	0,25	14,18	3,21	42,81	31,41	6,54	0	0,40	0	0	112,22
A66	0	0	0	0,24	12,87	2,68	50,67	24,70	7,08	0	0,45	0	0	111,22
A67	0	0	0	0,24	11,57	2,15	58,52	17,99	7,62	0	0,51	0	0	110,22
A68	0	0	0	0,44	22,61	4,22	31,08	36,38	4,14	0	0,29	0	0	98,94
A69	0	0	0	0,43	21,31	3,69	38,94	29,67	4,68	0	0,35	0	0	97,94
A70	0	0	0	0,43	20,01	3,17	46,79	22,96	5,22	0	0,41	0	0	96,94
A71	0	0	0	0,43	18,70	2,64	54,65	16,25	5,76	0	0,46	0	0	95,94
A72	0	0	0	0,62	28,44	4,18	35,06	27,93	2,83	0	0,30	0	0	83,66
A73	0	0	0	0,62	27,14	3,65	42,92	21,22	3,37	0	0,36	0	0	82,66
A74	0	0	0	0,61	25,84	3,12	50,77	14,52	3,91	0	0,42	0	0	81,66
A75	0	0	0	0,81	34,27	4,13	39,04	19,49	1,51	0	0,31	0	0	68,38
A76	0	0	0	0,80	32,97	3,61	46,90	12,78	2,05	0	0,37	0	0	67,38
A77	0	0	0	0,08	13,32	4,81	24,54	55,39	0,74	0	0,42	0	0	114,00
A78	0	0	0	0,09	16,08	5,82	25,46	50,09	0,99	0	0,52	0	0	105,00
A79	0	0	0	0	6,4	2,9	17,7	72,9	0	0	0	0	0	135,66
A80	0	0	0	0	11,9	4,1	23,2	54,2	6,3	0	0	0	0	134,90
A81	0	0	0	0	42,6	4,4	40,5	10,1	0,2	0	0	0	0	54,55
A82	0	0	0	0	2,6	1,2	20,6	20,6	13,3	0	0,9	10,7	25,6	101,30
A83	0	0	0	0	28,3	0,9	13,3	57,5	0	0	0	0	0	108,40
A84	0	0	0	0	14,2	7	44,7	32,8	0,2	0	0	0	0	104,00
A85	0	0	0	0	22,1	21	44	11,3	0	0	1,6	0	0	60,00

A86	0	0	0	0	10,6	6,8	49,4	19	0	0	4,1	2,4	0	91,00
A87	0	0	0	0	9,3	6,3	18,8	42,8	22,4	0	0,3	0	0	140,30
A88	0	0	0	0	5,2	3,9	11,8	71,6	6,9	0	0	0	0	151,30
A89	0	5,1	28,11	25,56	15,41	5,03	20,79	0	0	0	0	0	0	36,50
A90	0	0	0	0	11,29	3,96	19,98	58,39	5,86	0	0	0	0	120,00
A91	0	0	0	0,62	24,09	2,56	15,74	56,99	0	0	0	0	0	136,70
A92	0	0	0	0	14,2	6,9	43,1	34,4	0	0	0	0	0	110,00
A93	0	0	0	0	9,8	6,2	72,2	11,8	0	0	0	0	0	149,60
A94	0	0	0,5	0,2	4,8	5,7	20,6	66,2	0,8	0	0,4	0	0	138,40
A95	0	0	0	0,1	11	4	23,4	53,2	7,8	0	0,3	0	0,1	124,00
A96	0	0	0	0	40,3	3,1	43,4	13,2	0	0	0	0	0	56,20
A97	1,94	2,12	52,51	25,04	7,46	0,45	8,39	2,09	0	0	0	0	0	14,67
A98	0	0	0	0	8	2,1	22,6	38,1	28,1	0	0	0	0	150,36

APÊNDICE D

Amostras / Período de indução

Amostras	C8:0	C10:0	C12:0	C14:0	C16:0	C18:0	C18:1	C18:2	C18:3	C18:1 OH	C20:0	C20:1	C22:1	Período de indução
A1	0	0	0	0,6	6,9	3	75,2	12,4	1,2	0	0,4	0	0	8,5
A2	0,5	3,8	48,8	17,2	6,9	4	14,2	1,8	0	0	0	0	0	15,7
A3	0	0	0,2	2,9	24,3	22,8	40,2	3,3	0,7	0	0,2	0,6	0	1,6
A4	0	0	0	0	9,3	3,8	17,1	38,7	26,1	0	0	0	0	1,8
A5	0	0	0	0	5	2,2	17,7	18	37,9	0	1,7	9,8	0	1,3
A6	0	0	0	0	3,8	1,9	63,9	19	9,7	0	0,6	0	0	7,6
A7	0	0	0	0	0,9	1,1	3,1	4	0,6	90,3	0	0	0	1,1
A8	6,3	6	49,2	18,5	9,1	2,7	6,5	1,7	0	0	0	0	0	35,5
A9	0	0	0	0	11	3,4	70	12,7	0,8	0	0,6	0,1	0	8,1
A10	0	0	0	0	12,1	1,8	27,2	56,2	1,3	0	0,4	0	0	2,2
A11	0	0	0	0	6	1,8	6,6	76,3	9	0	0,3	0	0	0,2
A12	0	0	0	0	5,2	2,4	13,1	57,1	20	0	0,7	0	0	0,9
A13	0	0	0	0	12,7	5,5	39,1	41,6	0,2	0	0,2	0	0	2,3
A14	0	0	0	0	4,4	3,8	20,7	15,9	54,6	0	0,2	0	0	0,2
A15	0	0	0	0	5,5	5,8	76,3	0,7	0	0	3,1	2	0	2,3
A16	0	0	0	0	14,9	20,6	43,9	17,9	0,4	0	1,6	0	0	7,1
A17	0	0	0	0	5,3	2,2	16,6	13,7	62,1	0	0	0	0	0,2
A18	0	0	0,1	1	19,6	7,5	36,8	28,4	2	0	0,1	0	0	11,0
A19	0	0	0	0,3	12,5	2,1	47,5	35,4	1,1	0	0,6	0	0	0,4
A20	0	0	0	0	9,4	4,1	22	55,3	8,9	0	0	0	0	2,1
A21	0	0	0	0	4,2	3,3	63,6	27,6	0,2	0	0	0	0	2,0
A22	0	0	0,1	0,1	11,8	4,4	25,3	49,5	7,1	0	0,3	0	0	1,0
A23	0	0	0,1	0,5	14,3	8	35,6	35	4	0	0,3	0	0	5,2
A24	0	0	0,4	2,7	6,1	2,8	16,8	17	35,6	0	1,4	14,4	0	1,7
A25	0	0,1	0	0	4,2	2	60,4	21,2	9,6	0	0,7	1,5	0	7,6
A26	6,8	5,4	47,7	18,5	9,1	2,7	6,8	2,1	0,1	0	0,1	0	0	29,8
A27	0	0	0	0	11,5	1,9	26,6	58,7	0,6	0	0,3	0,1	0	2,0
A28	0	0	0,1	0,3	14,9	6,1	40,4	36,2	0,3	0	0,2	0,1	0	3,2
A29	0,8	0,5	0,3	1,1	42,1	4,2	40,8	9,5	0,3	0	0,3	0,1	0	11,2
A30	0	0,6	0,1	0	4,2	1,6	59,5	21,5	8,4	0	0,4	2,1	0	6,2
A31	0	0	0	0,1	8,2	2,5	14,2	74,3	0,1	0	0,1	0	0	3,1
A32	0	0	0,1	0,1	11,6	3,9	23,7	53,8	5,9	0	0,3	0,3	0	4,1
A33	0	0	0,1	0,1	6,4	3,6	21,6	66,2	1,5	0	0,3	0,2	0	0,9
A34	0	0,1	0,2	2,6	24,3	18,2	42,2	4,4	0,9	0	0,2	0,6	0	13,5
A35	0	0	0,2	0,8	16,5	7,1	44,6	25,1	1,1	0	0,3	0,5	0	6,0
A36	0	0	0	0,1	5	2	63,1	19,8	7,2	0	0,6	0	0	6,4
A37	0	0	0,3	1,2	44,1	4,1	39,1	10	0,2	0	0,3	0	0	10,9
A38	0	0	0	0,1	11,7	3,8	23,4	52,6	7,7	0	0,2	0	0	5,0
A39	0	0	0	0,1	4,7	3,9	81,7	7,7	0,3	0	0,3	0	0	6,2

A40	0	0	0	0	13,64	5,67	27,24	42,45	7,13	0	0,6	0	0	2,3
A41	0	0	0	0	12,9	5,33	25,86	40,64	6,72	5,15	0,55	0	0	2,6
A42	0	0	0	0	12,29	5,1	24,76	38,78	6,39	9,44	0,53	0	0	2,9
A43	0	0	0	0	11,68	4,88	23,65	36,92	6,06	13,73	0,5	0	0	3,1
A44	0	0	0	0	11,07	4,65	22,53	35,06	5,73	18,02	0,47	0	0	3,4
A45	0	0	0	0	10,46	4,42	21,42	33,21	5,4	22,32	0,44	0	0	3,6
A46	0	0	0	0	9,85	4,2	20,3	31,35	5,07	26,61	0,41	0	0	3,9
A47	0	0	0	0	7,14	3,06	15,35	24	3,58	45,49	0,27	0	0	9,3
A48	0	0	0	0	4,36	2,17	10,3	14,63	2,11	65,23	0,14	0	0	10,1
A49	0	0	0	0	3,75	1,95	9,19	12,77	1,78	69,52	0,11	0	0	12,2
A50	0	0	0	0	3,14	1,72	8,07	10,91	1,45	73,82	0,08	0	0	14,5
A51	0	0	0	0	2,53	1,49	6,96	9,05	1,12	78,11	0,05	0	0	16,9
A52	0	0	0	0	1,92	1,27	5,85	7,19	0,79	82,4	0,02	0	0	18,1
A53	0	0	0	0	1,44	1,16	4,99	5,29	0,55	85,83	0	0	0	19,7
A54	6,8	6,3	41	16,2	9,4	3,4	14,2	2,5	0	0	0	0	0	9,0
A55	6,8	6,3	41	16,2	9,4	3,4	14,2	2,5	0	0	0	0	0	7,5
A56	0	0	0	0,99	40,1	4,09	43,02	11,04	0,2	0	0,32	0	0	11,0
A57	0	0	0	0,05	4,44	1,67	62,4	19,73	9,47	0	0,56	0	0	6,9
A58	0	0	0	0,07	10,95	4,31	23,12	53,27	6,77	0	0,27	0	0	3,9
A59	0	0	0	0,07	9,65	3,78	30,98	46,56	7,31	0	0,33	0	0	4,2
A60	0	0	0	0,06	8,35	3,25	38,83	39,85	7,85	0	0,39	0	0	4,7
A61	0	0	0	0,06	7,04	2,73	46,69	33,15	8,39	0	0,44	0	0	5,2
A62	0	0	0	0,05	5,74	2,20	54,54	26,44	8,93	0	0,50	0	0	5,9
A63	0	0	0	0,25	16,78	4,27	27,10	44,82	5,46	0	0,28	0	0	4,2
A64	0	0	0	0,25	15,48	3,74	34,96	38,12	6,00	0	0,34	0	0	5,0
A65	0	0	0	0,25	14,18	3,21	42,81	31,41	6,54	0	0,40	0	0	5,7
A66	0	0	0	0,24	12,87	2,68	50,67	24,70	7,08	0	0,45	0	0	6,6
A67	0	0	0	0,24	11,57	2,15	58,52	17,99	7,62	0	0,51	0	0	7,8
A68	0	0	0	0,44	22,61	4,22	31,08	36,38	4,14	0	0,29	0	0	5,0
A69	0	0	0	0,43	21,31	3,69	38,94	29,67	4,68	0	0,35	0	0	6,3
A70	0	0	0	0,43	20,01	3,17	46,79	22,96	5,22	0	0,41	0	0	7,7
A71	0	0	0	0,43	18,70	2,64	54,65	16,25	5,76	0	0,46	0	0	9,3
A72	0	0	0	0,62	28,44	4,18	35,06	27,93	2,83	0	0,30	0	0	6,2
A73	0	0	0	0,62	27,14	3,65	42,92	21,22	3,37	0	0,36	0	0	8,0
A74	0	0	0	0,61	25,84	3,12	50,77	14,52	3,91	0	0,42	0	0	10,6
A75	0	0	0	0,81	34,27	4,13	39,04	19,49	1,51	0	0,31	0	0	7,4
A76	0	0	0	0,80	32,97	3,61	46,90	12,78	2,05	0	0,37	0	0	11,4
A77	0	0	0	0,08	13,32	4,81	24,54	55,39	0,74	0	0,42	0	0	4,4
A78	0	0	0	0,09	16,08	5,82	25,46	50,09	0,99	0	0,52	0	0	4,9
A79	0	0	0	0	6,4	2,9	17,7	72,9	0	0	0	0	0	3,8
A80	0	0	0	0	11,9	4,1	23,2	54,2	6,3	0	0	0	0	3,4
A81	0	0	0	0	42,6	4,4	40,5	10,1	0,2	0	0	0	0	15,3
A82	0	0	0	0	2,6	1,2	20,6	20,6	13,3	0	0,9	10,7	25,6	1,1
A83	0	0	0	0	28,3	0,9	13,3	57,5	0	0	0	0	0	4,1
A84	0	0	0	0	14,2	7	44,7	32,8	0,2	0	0	0	0	3,4
A85	0	0	0	0	22,1	21	44	11,3	0	0	1,6	0	0	5,2

A86	0	0	0	0	10,6	6,8	49,4	19	0	0	4,1	2,4	0	3,5
A87	0	0	0	0	9,3	6,3	18,8	42,8	22,4	0	0,3	0	0	4,8
A88	0	0	0	0	5,2	3,9	11,8	71,6	6,9	0	0	0	0	4,0
A89	0	5,1	28,11	25,56	15,41	5,03	20,79	0	0	0	0	0	0	16,4
A90	0	0	0	0	11,29	3,96	19,98	58,39	5,86	0	0	0	0	3,3
A91	0	0	0	0,62	24,09	2,56	15,74	56,99	0	0	0	0	0	3,9
A92	0	0	0	0	14,2	6,9	43,1	34,4	0	0	0	0	0	3,2
A93	0	0	0	0	9,8	6,2	72,2	11,8	0	0	0	0	0	2,4
A94	0	0	0,5	0,2	4,8	5,7	20,6	66,2	0,8	0	0,4	0	0	1,7
A95	0	0	0	0,1	11	4	23,4	53,2	7,8	0	0,3	0	0,1	3,8
A96	0	0	0	0	40,3	3,1	43,4	13,2	0	0	0	0	0	13,4
A97	1,94	2,12	52,51	25,04	7,46	0,45	8,39	2,09	0	0	0	0	0	20,2
A98	0	0	0	0	8	2,1	22,6	38,1	28,1	0	0	0	0	3,3

APÊNDICE E

Amostras / Número de cetano

Amostras	C8:0	C10:0	C12:0	C14:0	C16:0	C18:0	C18:1	C18:2	C18:3	C18:1 OH	C20:0	C20:1	C22:1	Número de cetano
A1	0	0	0,4	2,7	6,1	2,8	16,8	17	35,6	0	1,4	14,4	0	50,40
A2	0	0,1	0	0	4,2	2	60,4	21,2	9,6	0	0,7	1,5	0	53,70
A3	6,8	5,4	47,7	18,5	9,1	2,7	6,8	2,1	0,1	0	0,1	0	0	59,30
A4	0	0	0	0	11,5	1,9	26,6	58,7	0,6	0	0,3	0,1	0	55,70
A5	0	0	0,1	0,3	14,9	6,1	40,4	36,2	0,3	0	0,2	0,1	0	55,70
A6	0,8	0,5	0,3	1,1	42,1	4,2	40,8	9,5	0,3	0	0,3	0,1	0	61,90
A7	0	0,6	0,1	0	4,2	1,6	59,5	21,5	8,4	0	0,4	2,1	0	53,70
A8	0	0	0	0,1	8,2	2,5	14,2	74,3	0,1	0	0,1	0	0	51,10
A9	0	0	0,1	0,1	11,6	3,9	23,7	53,8	5,9	0	0,3	0,3	0	51,30
A10	0	0	0,1	0,1	6,4	3,6	21,6	66,2	1,5	0	0,3	0,2	0	51,10
A11	0	0,1	0,2	2,6	24,3	18,2	42,2	4,4	0,9	0	0,2	0,6	0	58,90
A12	0	0	0,2	0,8	16,5	7,1	44,6	25,1	1,1	0	0,3	0,5	0	56,90
A13	0	0	0	0	14,2	7	44,7	32,8	0,2	0	0	0	0	51,60
A14	0	0	0	0	22,1	21	44	11,3	0	0	1,6	0	0	50,00
A15	0	0	0	0	10,6	6,8	49,4	19	0	0	4,1	2,4	0	55,00
A16	0	0	0	0	9,3	6,3	18,8	42,8	22,4	0	0,3	0	0	49,10
A17	0	0	0	0	5,2	3,9	11,8	71,6	6,9	0	0	0	0	47,52
A18	0	0	0	0	14,2	6,9	43,1	34,4	0	0	0	0	0	57,10
A19	0	0	0	0	9,8	6,2	72,2	11,8	0	0	0	0	0	55,10
A20	0	0	0,5	0,2	4,8	5,7	20,6	66,2	0,8	0	0,4	0	0	55,60
A21	0	0	0	0,1	11	4	23,4	53,2	7,8	0	0,3	0	0,1	58,10
A22	0	0	0	0	40,3	3,1	43,4	13,2	0	0	0	0	0	54,60
A23	0	0	0	0	6,7	3,65	11,75	77,9	0	0	0	0	0	49,80
A24	0	0	0	1,15	23	5	19,1	51,75	0	0	0	0	0	51,20
A25	0	0	0	1,5	2	2,25	24	15	5,5	0	0	0	49,75	54,40
A26	0	0	0	0	5	3,45	28,5	56,35	6,7	0	0	0	0	46,60
A27	0	0	0	0	6,9	4,9	28,2	52	8	0	0	0	0	46,20
A28	0	0	0	1,5	39,2	5,3	45	9	0	0	0	0	0	56,20
A29	0	0	0,1	0,1	10,2	3,7	22,8	53,7	8,6	0	0	0	0	45,69
A30	0	0	0	0	12,9	3,7	22,2	52,9	7,9	0	0	0	0	46,54
A31	0	0	0	0	10,76	4,37	24,13	51,83	6,81	0	0	0	0	46,97
A32	0	0	0	0	10,5	3,9	23,3	53	7,6	0	0	0	0	46,30
A33	0	0	0	0,56	14,17	5,19	48,2	22,19	1,45	0	0	0	0	55,98
A34	0	0	0	0	10,7	3,2	25	53,3	5,4	0	0	0	0	46,95
A35	0	0	0	0	3,86	3,9	77,9	13,31	0	0	0	0	0	55,93
A36	0	0	0	0	11,75	3,15	23,26	55,53	6,31	0	0	0	0	46,25
A37	0	0	0	0	10,4	4,7	24,8	52,5	6,5	0	0	0	0	46,91
A38	0	0	0	0,1	10,3	4,7	22,6	54,1	0,6	0	0	0	0	48,93
A39	0	0	0	0,9	10,54	3,75	23,18	48,92	1,16	0	0	0	0	49,90

A40	0	0	0	0	6,8	3,26	16,93	73,01	0	0	0	0	0	44,10
A41	0	0	0	0	5,79	5,68	20,43	66,02	0	0	0	0	0	45,89
A42	0	0	0	0	6,1	4,1	18,6	69	0,3	0	0	0	0	44,92
A43	0	0	0	0	6,06	4,8	20,5	67,7	0,4	0	0	0	0	45,23
A44	0	0	0	0	6,38	4,09	23,68	63,29	0,36	0	0	0	0	46,13
A45	0	0	0	0	8,6	1,93	11,58	77,89	0	0	0	0	0	43,16
A46	0	0	0	0	6,1	4,2	24	63,5	0,4	0	0	0	0	46,03
A47	0	0	0	0	4,2	2	64	20,6	9,2	0	0	0	0	50,83
A48	0	0	0	0	3,5	0,9	64,1	22,3	8,2	0	0	0	0	50,54
A49	0	0	0	0	3,49	0,85	64,4	22,3	8,23	0	0	0	0	50,51
A50	0	0	0	0,1	4,8	0,4	61,6	20,6	9,2	0	0	0	0	50,77
A51	0	0	0	0	4,3	1,9	61,5	20,6	8,3	0	0	0	0	51,28
A52	0	0	0	1,2	20,6	4,6	19,54	52,5	0,4	0	0	0	0	50,97
A53	0	0	0,1	0,7	20,1	2,6	19,2	55,2	0,6	0	0	0	0	49,83
A54	0	0	0	0	28,7	0,9	13	57,4	0	0	0	0	0	50,60
A55	0	0	0	0	11,67	0,89	13,27	57,51	0	0	0	0	0	48,29
A56	0	0	0	0	28,33	0,9	13,27	57,5	0	0	0	0	0	50,51
A57	0	0	0	0	22,9	3,1	18,5	54,2	0,5	0	0	0	0	50,53
A58	0	0	0	0	11,38	2,39	48,28	31,95	0,93	0	0	0	0	52,96
A59	0	0	0	0,00	11,40	2,40	48,30	32,00	0,90	0	0,00	0	0	52,97
A60	0	0	0	0,00	11,20	3,20	45,50	31,70	0,40	0	0,00	0	0	53,44
A61	0	0	0	0,00	10,40	8,90	47,10	32,90	0,50	0	0,00	0	0	53,81
A62	0	0	0,1	1,00	42,80	4,50	40,50	10,10	0,20	0	0,00	0	0	63,45
A63	0	0	0	0,00	42,60	4,40	40,50	10,10	0,20	0	0,00	0	0	63,32
A64	0	0	0,3	1,10	42,70	4,30	40,90	9,20	0,20	0	0,00	0	0	63,62
A65	0	0	0,26	1,09	44,81	4,09	39,99	8,94	0,27	0	0,00	0	0	63,94
A66	0	0	0,38	0,98	43,32	3,81	40,57	10,25	0,25	0	0,00	0	0	63,36
A67	0	0	0,2	1,11	40,20	4,50	43,30	9,00	1,00	0	0,00	0	0	62,96
A68	0	0	0,46	1,22	47,76	4,23	37,00	9,07	0,26	0	0,00	0	0	64,45
A69	0	0	0,9	1,30	43,90	4,90	39,00	9,50	0,30	0	0,00	0	0	63,85
A70	0	0	0	0,00	39,50	4,10	43,20	10,60	0,20	0	0,00	0	0	62,64
A71	0	0	0,1	0,10	25,50	15,80	47,10	8,90	1,10	0	0,00	0	0	62,47
A72	0	0	0,1	2,80	23,30	19,40	42,40	2,90	0,90	0	0,00	0	0	64,68
A73	0	0	0,1	0,10	25,20	19,20	48,90	2,70	0,50	0	0,00	0	0	64,62
A74	0	0	0,1	2,30	23,10	15,40	45,80	3,50	0,60	0	0,00	0	0	63,84
A75	0	0	0	0,00	23,90	17,50	43,90	2,30	0,10	0	0,00	0	0	64,63
A76	0	0	0,6	2,91	24,34	19,10	40,23	2,58	3,30	0	0,00	0	0	64,00
A77	0	0	0	0,00	11,53	13,36	60,67	0,62	0,00	0	0,00	0	0	57,00
A78	0	0	0	0,00	7,10	5,00	19,20	68,70	0,00	0	0,00	0	0	49,00
A79	0	0	0	0	40	5	45	7	0	0	0	0	0	50,00
A80	0	0	0	0	23,93	19,54	38,54	6,43	0,32	0	0	0	0	54,00
A81	0	0	0,1	0,7	36,7	6,6	46,1	8,6	0,3	0	0,4	0,2	0	61,00
A82	0	0	0	0	11,6	3,1	75	7,8	0,6	0	0,3	0	0	57,00
A83	0	0	0	0,1	8	1,8	53,3	28,4	0,3	0	0,9	2,4	0	53,00
A84	0	0	0	0	4,9	1,6	33	20,4	7,9	0	0	9,2	23	55,00
A85	0	0	0	0	11,3	3,6	24,9	53	6,1	0	0,3	0,3	0,3	49,00

A86	0	0	0	0	6,2	3,7	25,2	63,1	0,2	0	0,3	0,2	0,1	50,00
A87	0	0	0	0,1	6,9	4	19	69,1	0,3	0	0,3	0	0	48,00
A88	0	0	0	0	4,6	3,4	62,8	27,5	0,1	0	0,3	0	0	53,00
A89	0	0	0	0	10,4	2,9	77,1	7,6	0,8	0	0,3	0	0	57,00
A90	0	0	0	0	6,5	1,4	65,6	25,2	0,1	0	0,1	0,1	0,1	53,00
A91	0	0	0	1	17,2	7,5	48,4	21,7	0	0	0	0	0	53,47
A92	0	0	0	0	15,6	10,5	60,9	5,2	7,4	0	0,3	0	0	57,48
A93	0	0	0	0	29	9,7	38,3	21,8	1,2	0	0	0	0	55,58
A94	0	0	0	0	25,1	6,7	46,1	15,4	3	0	0	0	0	51,90
A95	0	0	0	8	23	8	32	22	0	0	3	0	0	57,51
A96	0	0	0	0	8	15	56	18	0	0	3	0	0	54,99
A97	0	0	0	0	8	14	48	30	0	0	0	0	0	51,57
A98	0	0	0	0	17,9	18,5	42,7	13,7	2,1	0	0	0	0	57,30
A99	0	0	0	0,9	10,8	12,4	60	15	0	0	0,9	0	0	55,10
A100	0	0	0	0	14,9	14,4	61,9	7,5	0	0	1,3	0	0	57,83
A101	0	0	0	0	9,1	2,7	79,4	0,7	0,2	0	0	0	0	56,66
A102	0	0	0	0	10,6	6,8	49,4	19	0	0	4,1	2,4	0	55,84
A103	0	0	0	0	5,4	8,5	55,1	8,2	0	0	20,7	0	0	59,77
A104	0	0	0	0	19	14	63	3	0	0	1	0	0	59,32
A105	0	0	0	0	14,5	8,5	44	32,4	0	0	0	0	0	51,09
A106	0	0	0	3,5	35,1	4,5	53,3	0	0	0	1,1	0	0	61,22
A107	0	0	0	0	7,2	14,4	35,3	40,4	0	0	1,8	0	0	50,26
A108	0	0	0	0	17	7,8	32,4	31,3	7,2	0	0	0	0	50,46
A109	0	0	0	0	7,1	17,7	38,4	36,8	0	0	0	0	0	50,7
A110	0	0	0	0	23,1	12,8	21,5	29	13,6	0	0	0	0	48,52
A111	0	0	0	0	18,8	9	32,5	39,5	0	0	0	0	0	50,42
A112	0	0	0	0	19,7	2,4	37,3	39,8	0	0	0,6	0	0	49,60
A113	0	0	0	0	5,5	6,7	10,5	48,5	28,5	0	0	0	0	34,18
A114	0	0	2,8	5,5	9,9	1,1	15,8	22,1	42,7	0	0	0	0	34,25
A115	0	0	0	0	3,7	43,7	52,6	0	0	0	0	0	0	63,10
A116	0	0	0	0	0,7	46,4	49,5	0,9	0	0	2,5	0	0	63,52
A117	0	0	0	0	0,4	0,4	12	18	62	0	0	0	0	25,46
A118	0	4,3	87,9	1,9	0,5	5,4	0	0	0	0	0	0	0	63,20
A119	0	0	96,3	0	0	0	2,3	0	0	0	0	0	0	64,79
A120	0	0,1	85,9	3,8	0	0	4	3,3	0	0	0	0	0	64,05
A121	0	1,7	59,1	11,5	0	0	21	6,7	0	0	0	0	0	60,77
A122	0	0	0	0	9,5	18,4	56	0	16,1	0	0	0	0	52,26
A123	0	0	0	0	6,1	47,5	46,4	0	0	0	0	0	0	64,26
A124	0	0	0	0	4	6,1	14,8	71	1	0	3	0	0	41,25
A125	0	0	0	0,8	14,5	3,8	18,5	61,4	0	0	1	0	0	44,45
A126	0	0,8	35,6	50,7	4,5	0	8,3	0,1	0	0	0	0	0	66,13
A127	0	0,1	19,6	54,5	19,6	0	5,4	0	0	0	0	0	0	67,47
A128	0	0	0	0	0,2	13,8	45,3	0	0	0	34,7	4,2	0	64,86
A129	0	0	0	0	66	3,5	27,5	3	0	0	0	0	0	65,27
A130	0	0	0	0,1	17,8	14	46,3	17,9	0	0	3	0	0	56,61
A131	0	0	0	0	25,4	0	46,8	27,8	0	0	0	0	0	52,22

A132	0	0	0	0	24,4	7,2	50,5	15,8	0,6	0	0,7	0,2	0	56,33
A133	0	0	0	0,4	19,7	6,5	50,3	21,6	1,1	0	0	0	0	54,00
A134	0	0	0	3,2	3,1	2,6	88	2,9	0	0	0	0	0	54,50
A135	0	0	0	1,4	15,6	9,7	40,8	32,1	0	0	0,4	0	0	52,31
A136	0	0	0	0	9,7	2,4	83,8	0,8	0	0	3,3	0	0	56,32
A137	0	0	0	0	10,4	5,5	64,4	12,4	0	0	1,8	2,6	1,7	55,37
A138	0	0	0	11	1,2	0,5	56	29	0	0	2,3	0	0	49,90
A139	0	0	0	1,8	15,2	4,5	32,6	43,6	0	0	0	0	0	48,97
A140	0	0	0	0	16,6	8,8	30,5	36	8,1	0	0	0	0	48,30
A141	0	0	0	8	23	8	32	22	0	0	3	0	0	57,51
A142	0	0	0	2,4	5,4	0	45,8	46,4	0	0	0	0	0	45,20
A143	0	0	0	0	2,3	38,3	57,9	0,8	0,4	0	0	0,3	0	61,50
A144	0	0	0	0	2,5	56,4	39,4	1,7	0	0	0	0	0	65,16
A145	0	0	0	4,43	0	7,93	63,24	24,4	0	0	0	0	0	50,71
A146	0	0	0	0,1	8,1	1,2	20,8	67,7	0	0	0	0	0	41,37
A147	0	0	0	39,2	13,3	2,4	44,1	1	0	0	0	0	0	61,85
A148	0	0	0	0	9	0	14,6	73,7	2,7	0	0	0	0	38,73
A149	0	0	0	0,2	11	10,2	29,5	46,4	0,4	0	0	2,3	0	48,31

APÊNDICE F

Amostras / Massa específica

Amostras	C8:0	C10:0	C12:0	C14:0	C16:0	C18:0	C18:1	C18:2	C18:3	C18:1 OH	C20:0	C20:1	C22:1	Massa específica
A1	0	0	0	0,6	6,9	3	75,2	12,4	1,2	0	0,4	0	0	878,00
A2	0,5	3,8	48,8	17,2	6,9	4	14,2	1,8	0	0	0	0	0	876,00
A3	0	0	0,2	2,9	24,3	22,8	40,2	3,3	0,7	0	0,2	0,6	0	874,00
A4	0	0	0	0	9,3	3,8	17,1	38,7	26,1	0	0	0	0	886,50
A5	0	0	0	0	5	2,2	17,7	18	37,9	0	1,7	9,8	0	888,00
A6	0	0	0	0	3,8	1,9	63,9	19	9,7	0	0,6	0	0	882,00
A7	0	0	0	0	0,9	1,1	3,1	4	0,6	90,3	0	0	0	899,00
A8	6,3	6	49,2	18,5	9,1	2,7	6,5	1,7	0	0	0	0	0	807,30
A9	0	0	0	0	11	3,4	70	12,7	0,8	0	0,6	0,1	0	881,50
A10	0	0	0	0	12,1	1,8	27,2	56,2	1,3	0	0,4	0	0	885,00
A11	0	0	0	0	6	1,8	6,6	76,3	9	0	0,3	0	0	888,50
A12	0	0	0	0	5,2	2,4	13,1	57,1	20	0	0,7	0	0	888,50
A13	0	0	0	0	12,7	5,5	39,1	41,6	0,2	0	0,2	0	0	879,50
A14	0	0	0	0	4,4	3,8	20,7	15,9	54,6	0	0,2	0	0	892,50
A15	0	0	0	0	5,5	5,8	76,3	0,7	0	0	3,1	2	0	877,00
A16	0	0	0	0	14,9	20,6	43,9	17,9	0,4	0	1,6	0	0	884,50
A17	0	0	0	0	5,3	2,2	16,6	13,7	62,1	0	0	0	0	899,00
A18	0	0	0,1	1	19,6	7,5	36,8	28,4	2	0	0,1	0	0	880,50
A19	0	0	0	0,3	12,5	2,1	47,5	35,4	1,1	0	0,6	0	0	885,50
A20	0	0	0	0	9,4	4,1	22	55,3	8,9	0	0	0	0	884,00
A21	0	0	0	0	4,2	3,3	63,6	27,6	0,2	0	0	0	0	880,00
A22	0	0	0,1	0,1	11,8	4,4	25,3	49,5	7,1	0	0,3	0	0	855,50
A23	0	0	0,1	0,5	14,3	8	35,6	35	4	0	0,3	0	0	882,50
A24	0	0	0,4	2,7	6,1	2,8	16,8	17	35,6	0	1,4	14,4	0	882,00
A25	0	0,1	0	0	4,2	2	60,4	21,2	9,6	0	0,7	1,5	0	883,00
A26	6,8	5,4	47,7	18,5	9,1	2,7	6,8	2,1	0,1	0	0,1	0	0	874,00
A27	0	0	0	0	11,5	1,9	26,6	58,7	0,6	0	0,3	0,1	0	883,00
A28	0	0	0,1	0,3	14,9	6,1	40,4	36,2	0,3	0	0,2	0,1	0	876,00
A29	0,8	0,5	0,3	1,1	42,1	4,2	40,8	9,5	0,3	0	0,3	0,1	0	873,00
A30	0	0,6	0,1	0	4,2	1,6	59,5	21,5	8,4	0	0,4	2,1	0	879,00
A31	0	0	0	0,1	8,2	2,5	14,2	74,3	0,1	0	0,1	0	0	879,00
A32	0	0	0,1	0,1	11,6	3,9	23,7	53,8	5,9	0	0,3	0,3	0	882,00
A33	0	0	0,1	0,1	6,4	3,6	21,6	66,2	1,5	0	0,3	0,2	0	878,00
A34	0	0,1	0,2	2,6	24,3	18,2	42,2	4,4	0,9	0	0,2	0,6	0	878,00
A35	0	0	0,2	0,8	16,5	7,1	44,6	25,1	1,1	0	0,3	0,5	0	879,00
A36	0	0	0	0,1	5	2	63,1	19,8	7,2	0	0,6	0	0	885,00
A37	0	0	0,3	1,2	44,1	4,1	39,1	10	0,2	0	0,3	0	0	873,00
A38	0	0	0	0,1	11,7	3,8	23,4	52,6	7,7	0	0,2	0	0	884,00
A39	0	0	0	0,1	4,7	3,9	81,7	7,7	0,3	0	0,3	0	0	870,00

A40	0	0	0	0	13,64	5,67	27,24	42,45	7,13	0	0,6	0	0	876,30
A41	0	0	0	0	12,9	5,33	25,86	40,64	6,72	5,15	0,55	0	0	881,30
A42	0	0	0	0	12,29	5,1	24,76	38,78	6,39	9,44	0,53	0	0	882,10
A43	0	0	0	0	11,68	4,88	23,65	36,92	6,06	13,73	0,5	0	0	885,00
A44	0	0	0	0	11,07	4,65	22,53	35,06	5,73	18,02	0,47	0	0	885,10
A45	0	0	0	0	10,46	4,42	21,42	33,21	5,4	22,32	0,44	0	0	888,10
A46	0	0	0	0	9,85	4,2	20,3	31,35	5,07	26,61	0,41	0	0	888,70
A47	0	0	0	0	7,14	3,06	15,35	24	3,58	45,49	0,27	0	0	896,90
A48	0	0	0	0	4,36	2,17	10,3	14,63	2,11	65,23	0,14	0	0	905,80
A49	0	0	0	0	3,75	1,95	9,19	12,77	1,78	69,52	0,11	0	0	908,40
A50	0	0	0	0	3,14	1,72	8,07	10,91	1,45	73,82	0,08	0	0	910,20
A51	0	0	0	0	2,53	1,49	6,96	9,05	1,12	78,11	0,05	0	0	911,80
A52	0	0	0	0	1,92	1,27	5,85	7,19	0,79	82,4	0,02	0	0	913,70
A53	0	0	0	0	1,44	1,16	4,99	5,29	0,55	85,83	0	0	0	915,70
A54	6,8	6,3	41	16,2	9,4	3,4	14,2	2,5	0	0	0	0	0	876,00
A55	6,8	6,3	41	16,2	9,4	3,4	14,2	2,5	0	0	0	0	0	878,00
A56	0	0	0	0,99	40,1	4,09	43,02	11,04	0,2	0	0,32	0	0	875,00
A57	0	0	0	0,05	4,44	1,67	62,4	19,73	9,47	0	0,56	0	0	878,00
A58	0	0	0	0,07	10,95	4,31	23,12	53,27	6,77	0	0,27	0	0	883,00
A59	0	0	0	0,07	9,65	3,78	30,98	46,56	7,31	0	0,33	0	0	882,00
A60	0	0	0	0,06	8,35	3,25	38,83	39,85	7,85	0	0,39	0	0	881,00
A61	0	0	0	0,06	7,04	2,73	46,69	33,15	8,39	0	0,44	0	0	880,00
A62	0	0	0	0,05	5,74	2,20	54,54	26,44	8,93	0	0,50	0	0	879,00
A63	0	0	0	0,25	16,78	4,27	27,10	44,82	5,46	0	0,28	0	0	881,40
A64	0	0	0	0,25	15,48	3,74	34,96	38,12	6,00	0	0,34	0	0	880,40
A65	0	0	0	0,25	14,18	3,21	42,81	31,41	6,54	0	0,40	0	0	879,40
A66	0	0	0	0,24	12,87	2,68	50,67	24,70	7,08	0	0,45	0	0	878,40
A67	0	0	0	0,24	11,57	2,15	58,52	17,99	7,62	0	0,51	0	0	877,40
A68	0	0	0	0,44	22,61	4,22	31,08	36,38	4,14	0	0,29	0	0	879,80
A69	0	0	0	0,43	21,31	3,69	38,94	29,67	4,68	0	0,35	0	0	878,80
A70	0	0	0	0,43	20,01	3,17	46,79	22,96	5,22	0	0,41	0	0	877,80
A71	0	0	0	0,43	18,70	2,64	54,65	16,25	5,76	0	0,46	0	0	876,80
A72	0	0	0	0,62	28,44	4,18	35,06	27,93	2,83	0	0,30	0	0	878,20
A73	0	0	0	0,62	27,14	3,65	42,92	21,22	3,37	0	0,36	0	0	877,20
A74	0	0	0	0,61	25,84	3,12	50,77	14,52	3,91	0	0,42	0	0	876,20
A75	0	0	0	0,81	34,27	4,13	39,04	19,49	1,51	0	0,31	0	0	876,60
A76	0	0	0	0,80	32,97	3,61	46,90	12,78	2,05	0	0,37	0	0	875,60
A77	0	0	0	0,08	13,32	4,81	24,54	55,39	0,74	0	0,42	0	0	882,80
A78	0	0	0	0,09	16,08	5,82	25,46	50,09	0,99	0	0,52	0	0	878,40
A79	0	0	0	0	6,4	2,9	17,7	72,9	0	0	0	0	0	860,00
A80	0	0	0	0	11,9	4,1	23,2	54,2	6,3	0	0	0	0	880,00
A81	0	0	0	0	42,6	4,4	40,5	10,1	0,2	0	0	0	0	875,00
A82	0	0	0	0	2,6	1,2	20,6	20,6	13,3	0	0,9	10,7	25,6	850,00
A83	0	0	0	0	28,3	0,9	13,3	57,5	0	0	0	0	0	857,00
A84	0	0	0	0	14,2	7	44,7	32,8	0,2	0	0	0	0	880,00
A85	0	0	0	0	22,1	21	44	11,3	0	0	1,6	0	0	872,00

A86	0	0	0	0	10,6	6,8	49,4	19	0	0	4,1	2,4	0	867,00
A87	0	0	0	0	9,3	6,3	18,8	42,8	22,4	0	0,3	0	0	876,00
A88	0	0	0	0	5,2	3,9	11,8	71,6	6,9	0	0	0	0	879,00
A89	0	5,1	28,11	25,56	15,41	5,03	20,79	0	0	0	0	0	0	874,40
A90	0	0	0	0	11,29	3,96	19,98	58,39	5,86	0	0	0	0	884,80
A91	0	0	0	0,62	24,09	2,56	15,74	56,99	0	0	0	0	0	880,30
A92	0	0	0	0	14,2	6,9	43,1	34,4	0	0	0	0	0	880,00
A93	0	0	0	0	9,8	6,2	72,2	11,8	0	0	0	0	0	871,00
A94	0	0	0,5	0,2	4,8	5,7	20,6	66,2	0,8	0	0,4	0	0	862,00
A95	0	0	0	0,1	11	4	23,4	53,2	7,8	0	0,3	0	0,1	880,00
A96	0	0	0	0	40,3	3,1	43,4	13,2	0	0	0	0	0	875,00
A97	1,94	2,12	52,51	25,04	7,46	0,45	8,39	2,09	0	0	0	0	0	877,00
A98	0	0	0	0	8	2,1	22,6	38,1	28,1	0	0	0	0	878,90

APÊNDICE G

Amostras / PEFF

Amostras	C8:0	C10:0	C12:0	C14:0	C16:0	C18:0	C18:1	C18:2	C18:3	C18:1 OH	C20:0	C20:1	C22:1	PEFF
A1	0	0	0,1	0,7	36,7	6,6	46,1	8,6	0,3	0	0,4	0,2	0	10
A2	0	0	0	0	11,6	3,1	75	7,8	0,6	0	0,3	0	0	-6
A3	0	0	0	0,1	8	1,8	53,3	28,4	0,3	0	0,9	2,4	0	17
A4	0	0	0	0	4,9	1,6	33	20,4	7,9	0	0	9,2	23	-10
A5	0	0	0	0	11,3	3,6	24,9	53	6,1	0	0,3	0,3	0,3	-5
A6	0	0	0	0	6,2	3,7	25,2	63,1	0,2	0	0,3	0,2	0,1	-3
A7	0	0	0	0,1	6,9	4	19	69,1	0,3	0	0,3	0	0	-6
A8	0	0	0	0	4,6	3,4	62,8	27,5	0,1	0	0,3	0	0	-6
A9	0	0	0	0	10,4	2,9	77,1	7,6	0,8	0	0,3	0	0	-6
A10	0	0	0	0	6,5	1,4	65,6	25,2	0,1	0	0,1	0,1	0,1	12
A11	0	0	0	0	13,64	5,67	27,24	42,45	7,13	0	0,6	0	0	-5,0
A12	0	0	0	0	12,9	5,33	25,86	40,64	6,72	5,15	0,55	0	0	-5,0
A13	0	0	0	0	12,29	5,1	24,76	38,78	6,39	9,44	0,53	0	0	-5,0
A14	0	0	0	0	11,68	4,88	23,65	36,92	6,06	13,73	0,5	0	0	-6,0
A15	0	0	0	0	11,07	4,65	22,53	35,06	5,73	18,02	0,47	0	0	-6,0
A16	0	0	0	0	10,46	4,42	21,42	33,21	5,4	22,32	0,44	0	0	-7,0
A17	0	0	0	0	9,85	4,2	20,3	31,35	5,07	26,61	0,41	0	0	-7,0
A18	0	0	0	0	7,14	3,06	15,35	24	3,58	45,49	0,27	0	0	-9,0
A19	0	0	0	0	4,36	2,17	10,3	14,63	2,11	65,23	0,14	0	0	-6,0
A20	0	0	0	0	3,75	1,95	9,19	12,77	1,78	69,52	0,11	0	0	-6,0
A21	0	0	0	0	3,14	1,72	8,07	10,91	1,45	73,82	0,08	0	0	-4,0
A22	0	0	0	0	2,53	1,49	6,96	9,05	1,12	78,11	0,05	0	0	-3,0
A23	0	0	0	0	1,92	1,27	5,85	7,19	0,79	82,4	0,02	0	0	1,0
A24	0	0	0	0	1,44	1,16	4,99	5,29	0,55	85,83	0	0	0	4,0
A25	0	0	0	0,6	6,9	3	75,2	12,4	1,2	0	0,4	0	0	-7,0
A26	0,5	3,8	48,8	17,2	6,9	4	14,2	1,8	0	0	0	0	0	10,0
A27	0	0	0,2	2,9	24,3	22,8	40,2	3,3	0,7	0	0,2	0,6	0	14,0
A28	0	0	0	0	9,3	3,8	17,1	38,7	26,1	0	0	0	0	-4,0
A29	0	0	0	0	5	2,2	17,7	18	37,9	0	1,7	9,8	0	-1,0
A30	0	0	0	0	3,8	1,9	63,9	19	9,7	0	0,6	0	0	-13,0
A31	0	0	0	0	0,9	1,1	3,1	4	0,6	90,3	0	0	0	7,0
A32	0	0	0	1,3	21,6	9	50,4	12,2	1	0	0,2	0,5	0,3	6,0
A33	6,3	6	49,2	18,5	9,1	2,7	6,5	1,7	0	0	0	0	0	-4,0
A34	0	0	0	0	11	3,4	70	12,7	0,8	0	0,6	0,1	0	-4,0
A35	0	0	0	0	12,1	1,8	27,2	56,2	1,3	0	0,4	0	0	-3,0
A36	0	0	0	0	6	1,8	6,6	76,3	9	0	0,3	0	0	-10,0
A37	0	0	0	0	5,2	2,4	13,1	57,1	20	0	0,7	0	0	-6,0
A38	0	0	0,2	1	20,7	8,9	46,7	15,6	0,5	0	0,2	0,8	0,4	13,0
A39	0	0,1	0,1	1,5	28	20,2	36,1	9,7	0,3	0	0,2	0,7	0,3	6,0

A40	0	0	0	0	12,7	5,5	39,1	41,6	0,2	0	0,2	0	0	0,0
A41	0	0	0	0	4,4	3,8	20,7	15,9	54,6	0	0,2	0	0	-8,0
A42	0	0	0	0	5,5	5,8	76,3	0,7	0	0	3,1	2	0	13,0
A43	0	0	0	0	14,9	20,6	43,9	17,9	0,4	0	1,6	0	0	11,0
A44	0	0	0,2	0,5	43,4	4,6	41,9	8,6	0,3	0	0,3	0	0	12,0
A45	0	0	0	0	5,3	2,2	16,6	13,7	62,1	0	0	0	0	-11,0
A46	0	0	0,1	1	19,6	7,5	36,8	28,4	2	0	0,1	0	0	2,0
A47	0	0	0	0,3	12,5	2,1	47,5	35,4	1,1	0	0,6	0	0	-3,0
A48	0	0	0	0	9,4	4,1	22	55,3	8,9	0	0	0	0	-4,0
A49	0	0	0,4	0,1	7,5	2,3	16,7	31,5	41,5	0	0	0	0	-12,0
A50	0	0	0	0	4,2	3,3	63,6	27,6	0,2	0	0	0	0	-3,0
A51	0	0	0,1	0,1	11,8	4,4	25,3	49,5	7,1	0	0,3	0	0	-2,0
A52	0	0	0,1	0,5	14,3	8	35,6	35	4	0	0,3	0	0	2,0
A53	0	0	0	0,99	40,1	4,09	43,02	11,04	0,2	0	0,32	0	0	10,0
A54	0	0	0	0,05	4,44	1,67	62,4	19,73	9,47	0	0,56	0	0	-20,0
A55	0	0	0	0,07	10,95	4,31	23,12	53,27	6,77	0	0,27	0	0	-3,0
A56	0	0	0	0,07	9,65	3,78	30,98	46,56	7,31	0	0,33	0	0	-2,0
A57	0	0	0	0,06	8,35	3,25	38,83	39,85	7,85	0	0,39	0	0	-4,0
A58	0	0	0	0,06	7,04	2,73	46,69	33,15	8,39	0	0,44	0	0	-8,0
A59	0	0	0	0,05	5,74	2,20	54,54	26,44	8,93	0	0,50	0	0	-13,0
A60	0	0	0	0,25	16,78	4,27	27,10	44,82	5,46	0	0,28	0	0	-3,0
A61	0	0	0	0,25	15,48	3,74	34,96	38,12	6,00	0	0,34	0	0	-4,0
A62	0	0	0	0,25	14,18	3,21	42,81	31,41	6,54	0	0,40	0	0	-4,0
A63	0	0	0	0,24	12,87	2,68	50,67	24,70	7,08	0	0,45	0	0	-6,0
A64	0	0	0	0,24	11,57	2,15	58,52	17,99	7,62	0	0,51	0	0	-5,0
A65	0	0	0	0,44	22,61	4,22	31,08	36,38	4,14	0	0,29	0	0	0,0
A66	0	0	0	0,43	21,31	3,69	38,94	29,67	4,68	0	0,35	0	0	-2,0
A67	0	0	0	0,43	20,01	3,17	46,79	22,96	5,22	0	0,41	0	0	-3,0
A68	0	0	0	0,43	18,70	2,64	54,65	16,25	5,76	0	0,46	0	0	-3,0
A69	0	0	0	0,62	28,44	4,18	35,06	27,93	2,83	0	0,30	0	0	5,0
A70	0	0	0	0,62	27,14	3,65	42,92	21,22	3,37	0	0,36	0	0	3,0
A71	0	0	0	0,61	25,84	3,12	50,77	14,52	3,91	0	0,42	0	0	2,0
A72	0	0	0	0,81	34,27	4,13	39,04	19,49	1,51	0	0,31	0	0	8,0
A73	0	0	0	0,80	32,97	3,61	46,90	12,78	2,05	0	0,37	0	0	7,0
A74	0	0	0	0,08	13,32	4,81	24,54	55,39	0,74	0	0,42	0	0	-5,0
A75	0	0	0	0,09	16,08	5,82	25,46	50,09	0,99	0	0,52	0	0	10,0
A76	0	0	0	0	9,3	6,3	18,8	42,8	22,4	0	0,3	0	0	-6,0
A77	0	0	0	0	5,2	3,9	11,8	71,6	6,9	0	0	0	0	-11,0
A78	0	5,1	28,11	25,56	15,41	5,03	20,79	0	0	0	0	0	0	-6,0
A79	0	0	0	0	11,29	3,96	19,98	58,39	5,86	0	0	0	0	-6,0
A80	0	0	0	0,62	24,09	2,56	15,74	56,99	0	0	0	0	0	5,0
A81	1,94	2,12	52,51	25,04	7,46	0,45	8,39	2,09	0	0	0	0	0	5,0
A82	0	0	0	0	8	2,1	22,6	38,1	28,1	0	0	0	0	-5,0
A83	0	0	0	0	14,2	6,9	43,1	34,4	0	0	0	0	0	2,0
A84	0	0	0	0	40,3	3,1	43,4	13,2	0	0	0	0	0	12

APÊNDICE H

Telas / Oleodata



Login

Usuário:

Senha:

[Novo Usuário](#)

Oleodata

O Sistema Oleodata é um trabalho desenvolvido pela parceria dos laboratórios LSI (Laboratório de Sistemas Inteligentes), LPQA (Laboratório de Pesquisa em Química Analítica) e LAPQAP (Laboratório de Análise e Pesquisa em Química Analítica de Petróleo). O sistema permite armazenar, organizar, padronizar e compartilhar dados e resultados obtidos no processo de qualificação de óleos vegetais, produção de biodiesel a partir de matrizes vegetais e outras aplicações da área de biotecnologia.

Clique [aqui](#) e faça parte do projeto.

©LAPQAP/LPQA - Todos os direitos reservados.
Desenvolvido pelo LSI.

om dia , Alex



sair

Componentes Relatórios Avançados Usuário

Lista de Óleos

... Adicionar Óleo ...

Nº	Data de Cadastro	Óleo	Criador	Ação
0	09/10/2014	SO0	barradas.alex@gmail.com	EXCLUIR
1	09/10/2014	PM0	barradas.alex@gmail.com	EXCLUIR
2	09/10/2014	BA0	barradas.alex@gmail.com	EXCLUIR
3	09/10/2014	DE0	barradas.alex@gmail.com	EXCLUIR
4	09/10/2014	MA0	barradas.alex@gmail.com	EXCLUIR
5	11/01/2013	MI0	adriano_asr@hotmail.com	EXCLUIR
6	11/01/2013	DE0	adriano_asr@hotmail.com	EXCLUIR
7	04/01/2013	MA0	adriano_asr@hotmail.com	EXCLUIR
8	10/12/2012	BA1	adriano_asr@hotmail.com	EXCLUIR
9	09/12/2012	BA1	adriano_asr@hotmail.com	EXCLUIR
10	03/12/2012	MA1	adriano.asr.rego@gmail.com	EXCLUIR
11	01/12/2012	MA1	adriano_asr@hotmail.com	EXCLUIR
12	01/01/1970	BA0	adriano_asr@hotmail.com	EXCLUIR

©2012 LAPQAP/LPQA - Todos os direitos reservados.
Desenvolvido pelo LSI.

Atualização do Óleo

Identificador:

Data de Cadastro:

Oleaginosa:

 ?

Volume (mL):

 ?

Massa (g):

 ?

Data de Extração:

 ?

Local de Obtenção do Óleo:

 ?

O Óleo sofreu algum processo de refino?

Sim Não

Descrição do Refino:

 ?

Cadastro Realizado Por:

Add de Ácidos Graxos Majoritários:

Ácidos Majoritários	Ação	Ácidos Disponíveis
<input type="text"/>	<input type="button" value="<<<"/> <input type="button" value=">>>"/>	acido 1 acido 2 acido 3 acido 4 acido 5 acido 6

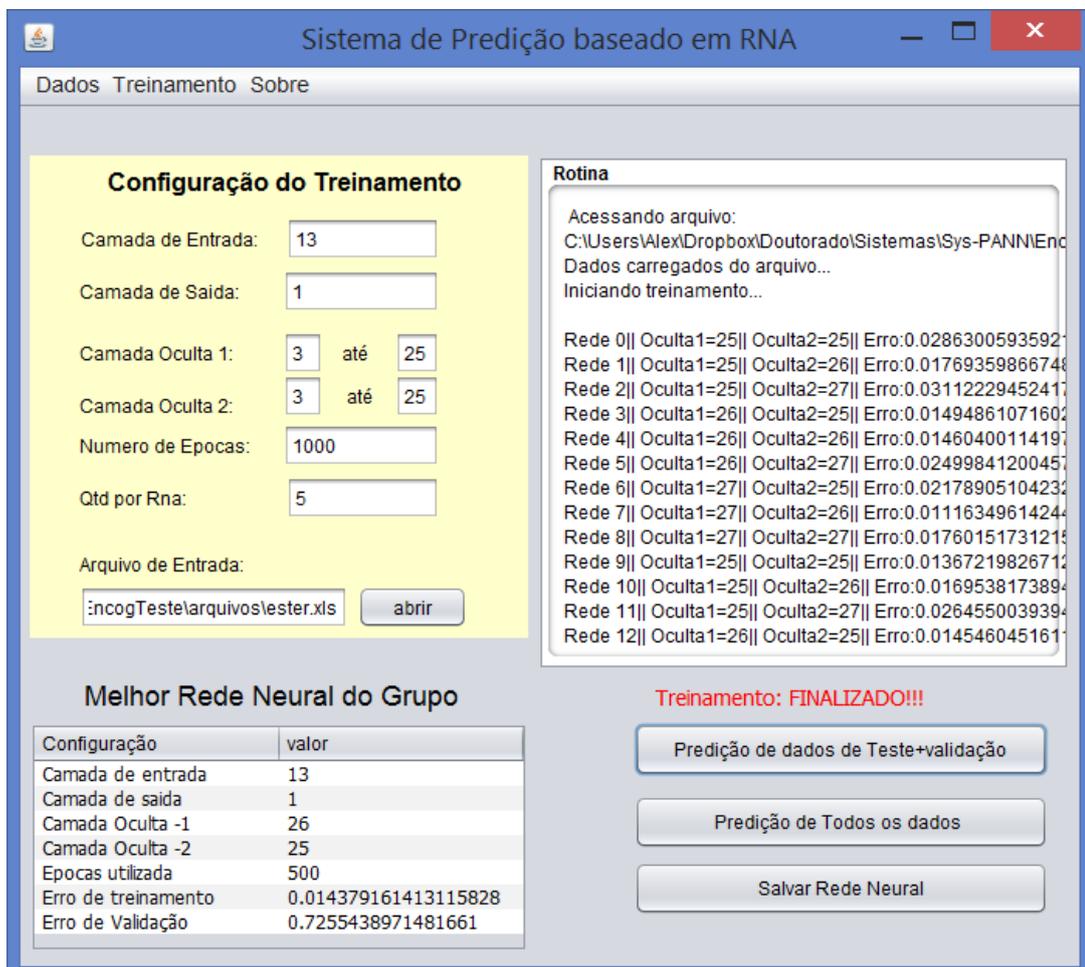
Amostras de Óleo:

...: Adicionar Amostra do Óleo ...

Número	Volume	Acidez	Ação
0	500	1	EXCLUIR

APÊNDICE I

Telas / Apps Java



Predição de dados por RNA Salva

Rede Neural Atual

Camada de Entrada:

Camada de Saida:

Camada Oculta 1:

Camada Oculta 2:

Numero de Epocas:

Taxa do Erro:

treinamento:

validação:

Selecione uma rede Neural:

N	data	Nome da RNA
0	21/03/2013	testesalva
1	21/03/2013	teste2
2	21/03/2013	teste3
3	25/03/2013	teste_limiar1
4	25/03/2013	teste_limiar2
5	01/04/2013	teste 5
6	30/09/2013	melhor_3
7	22/10/2013	melhor_1_final

Predição dos dados baseados na RNA selecionada

Arquivo:

Qtd de itens para predi...

N	Valor