Análise Raman e lógica paraconsistente para a análise e tomada de decisão sobre o grau de adulteração da gasolina tipo C

Claudio Luiz Firmino[1], Landulfo Silveira Jr.[1,2], Marcos Tadeu T. Pacheco[1,2]

[1]Universidade Santa Cecília (UNISANTA), Santos-SP, Brasil
[2]Universidade Anhembi Morumbi (UAM), São José dos Campos, SP, Brasil

E-mail: klausfir@gmail.com

Resumo: A espectroscopia Raman em conjunto com a Lógica Paraconsistente Anotada de dois valores (LPA2v) pode ser capaz de testar a qualidade da gasolina C comumente usada em automóveis. A proposta do processo consiste em, a partir da análise de uma coleta de combustível usada como padrão, poder-se comparar com análises feitas em outras amostras de diferentes origens (postos de combustíveis) e, posteriormente, através de método usado para tomada de decisão originado de lógica não clássica denominada de Lógica Paraconsistente Anotada com anotação de 2 valores (LPA2v), obter com precisão o grau de certeza e o grau de incerteza, ou seja, evidências de o quanto as amostras estão próximas das amostras padronizadas. Para que a espectroscopia possa fazer uma análise bem-sucedida, é necessário retirar toda, ou pelo menos o máximo possível de interferências no sinal obtido na coleta. Essas interferências são classificadas como fluorescência, ruído térmico, *shot noise*, raios cósmicos e níveis de baixa resolução. O objetivo dessa proposta é através de programas simuladores comparar o espectro puro com espectro com ruído e criar graus de evidência para a utilização dos processos baseados em lógica paraconsistente de dois valores para fazer as comparações.

Palavras-chave: Espectroscopia Raman; análise de componente principal; lógica paraconsistente anotada de dois valores; gasolina; adulteração; ruído.

Raman analysis and paraconsistent logic for the analysis and decision-making on the degree of adulteration of type C gasoline

Abstract: Raman spectroscopy in conjunction with Paraconsistent Annotated Logic with annotation of two values can be used to test the quality of gasoline C commonly used in automobiles. The process consists from the analysis of a fuel collection used as a standard, it can be compared with analyzes made on other samples from different sources (fuel stations), and later, through the non-classical logic called Paraconsistent Annotated Logic with annotation of 2 values (PAL2v) method used for decision making it is possible to obtain the degree of certainty and the degree of uncertainty, that is, evidence of how close the samples are to the standardized samples. In order for spectroscopy to perform a successful analysis, it is necessary to remove all, or at least remove as much interference as possible in the signal obtained in the collection. These interferences are classified as fluorescence, thermal noise, shot noise, cosmic rays and low resolution. The purpose of this article is it is through simulator programs to compare pure Spectro with Noise Spectro and create degrees of evidence for using the two-value paraconsistent logic-based processes to make the comparisons.

Keywords: Raman Spectroscopy; main component analysis; annotated paraconsistent logic of two gasoline values; adulteration; noise.

Introdução

O petróleo é a fonte de energia mais importante desde sua descoberta e, em 1959, proporcionou inúmeros avanços tecnológicos, sendo responsável pelo desenvolvimento, por exemplo, de uma revolução em nossos meios de locomoção [2].

A nafta, popularmente conhecida como gasolina é obtida do refinamento e do craqueamento do petróleo sendo composta por uma mistura de hidrocarbonetos com cinco a dez átomos de carbono na cadeia. Assim, a qualidade da gasolina, varia de acordo com os hidrocarbonetos que a compõe [3].

A gasolina é classificada em A, nas refinarias ou petroquímicas e não possui etanol, sua densidade, em geral, varia de 700 a 770 g/L; e C, em virtude da adição de etanol anidro que recebe. Os tipos de combustível no Brasil são por força da lei federal, misturados com 27% de álcool anidro. A cor da gasolina original varia de incolor à amarelada a depender da composição química e dos diversos processos de refino. Somente a gasolina podium é incolor.

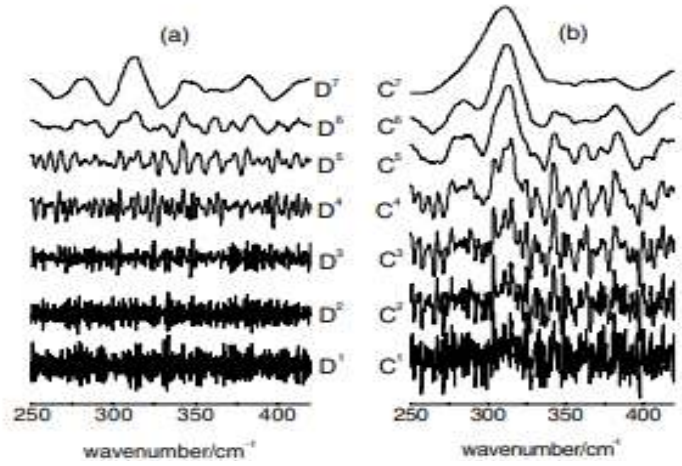
Tratamento do ruído em sinais de espectroscopia – *Shot Noise*

O Shot-noise pode ser descrito como uma fonte de ruído branco que pode ser considerado como espectro que possui frequencia independente com variação proporcional a média do tempo da potência da luz, porém o Shot-noise, difere do ruído branco porque possui diferentes correlações entre os diferentes componentes de frequência.

O ruído branco, por sua vez possui diferentes fases com interferência nas ondas eletromagnéticas. Estas diferenças afetam significativamente a estrategia dedesmodulação do sinal (retirar as moduladoras) e reestabelecer o sinal original.

A base desse estudo seleciona amostras de etanol e gasolina em vários postos de venda de combustíveis. Essas amostras são submetidas a análise por meio de técnicas utilizando espectroscopia Raman. Levando em consideração a composição química de cada combustível, nesse estudo etanol e gasolina, é estabelecido um padrão considerado otimizado.

Para as análises de contaminação da gasolina o sinal obtido pela análise Raman tem que ser limpo, os ruídos devem ser separados do sinal original para então ser interpretados de forma exata. A figura 1 mostra dois aspectos do sinal de espectroscopia Raman com ruido e com eliminação do ruido.



(a) (b)

Figura 1. Decomposição do espectro Raman da solução CCl4 de 30% de concentração. (a) Correspondentes ao ruído; (b) Correspondentes ao sinal Raman após eliminar ruído.

Técnicas de Análises -PCA e LPA2v

A PCA é uma técnica que pode ser usada para simplificar um conjunto de dados, eliminando a redundância. Basicamente o processo de tratamento dos dados consiste em efetuação de uma transformação linear que escolhe um novo sistema de coordenadas ortogonais para o conjunto de dados, de maneira que a maior variância por qualquer projeção dos dados aparece no primeiro eixo (então chamado de primeiro componente principal), a segunda maior variância no segundo eixo, e assim por diante. A técnica PCA pode ser usado para reduzir a dimensionalidade, comprimir dados, eliminando desta forma os componentes principais posteriores que contenham informação não relevante (principalmente ruído). Como é ortogonal (90°), a informação de um componente principal não está presente nos próximos componentes principais [4].

Recentemente tem-se utilizado os algoritmos da Lógica Paraconsistente para as análises dos sinais de espectroscopia Raman.

A Lógica Paraconsistente é uma Lógica Não Clássica que revoga o princípio da Não Contradição e admite o tratamento de sinais contraditórios na sua estrutura teórica [1]. As informações sobre a qualidade da gasolina, são catalogadas e organizadas em planilha eletrônica com os valores de medições padronizados. Neste trabalho foram utilizadas planilhas Excel para adentrar com os dados no Matlab aplicando a técnica a ser aplicada baseada em LPA2v. Foram analisadas as planilhas com valores dos sinais resultantes da aquisição do espectro da gasolina tipo C através do processo Raman.

Objetivos

Testar a qualidade da gasolina tipo C com uso de obtenção de sinais através da espectroscopia Raman e análises técnicas usando PCA (análise de componente principal) e a LPA (lógica paraconsistente anotada de dois valores), com verificação comparativa entre as duas formas de análises utilizadas.

Materiais e Métodos

Foram coletadas amostras de gasolina tipo C de 15 postos de combustíveis diferentes cujo espectros dos sinais Raman possuíam ruídos. Desses 15 postos de combustíveis, foram eleitos 5 postos (postos de combustíveis 03,04,05,13 e 15), cujo as amostras, apresentaram sinal espectro puro. Foram utilizados os espectros puros como um padrão otimizado, ou seja, com alto grau de evidência estabelecido para uso na lógica paraconsistente de 2 valores.

No procedimento de análise comparativa, inicialmente as planilhas contendo os dados padronizados e as demais análises coletadas, foram submetidas a análise de *software* desenvolvido em MatLab que analisa através de LPA2v e detecta quais amostras mais se aproximam da amostra padrão, obtidas anteriormente através de outras técnicas, tais como a PCA.

Resultados e discussão

Os resultados obtidos nas análises comparativas estão mostrados na tabela 1.

Tabela 1. Resumo de resultados obtidos com relação ao grau de acerto.

	Erro	Acerto	
MPoly8»RAW (limpos fluoresc)	6,67%	93,33%	
MPoly8»RAW tempo reduz (orig)	13,33%	86,67%	
MPoly8»RAW tempo reduz (10s)	13,33%	86,67%	
MPoly8»RAW tempo reduz (5s)	0,00%	100,00%	Melhor caso
MPoly8»RAW tempo reduz (1s)	13,33%	86,67%	
MPoly8»RAW tempo reduz (0.5s)	26,67%	73,33%	

A tabela 1 demonstra os resultados obtidos na análise no que aponta para 100% de acerto a análise com ocorrência de 5 segundos.

Os resultados obtidos na tabela 1 demonstram que a amostra exposta a análise em 5 segundos aponta o melhor resultado, no entanto isso não significa que quanto maior ou menor o tempo de análise, melhor será o resultado obtido. Para isto pode

observar as amostras expostas a análise de 1, 5, 10 segundos que geraram resultados iguais, ou seja, o mesmo grau de certeza de 86,67%.

O grau de certeza com 100% de acerto só ocorreu no tempo de 5 segundos. Isso também não quer dizer que as amostras expostas a análise por um tempo maior ou menor que 5 segundos, definem que a amostra da gasolina deva ser considerada ruim. Outras causas deverão ser consideradas para alcançar este nível de segurança.

Sobre Raios Cósmicos, verificou-se que as amostras expostas a análise em 5 segundos, e a temperatura de 75° Celsius, geraram quantidade de 20 raios cósmicos que surgiram aleatoriamente. A largura e a frequência com que surgiram também são aleatórias. Devido a este aspecto aleatório foi retirado a incidência dos Raios Cósmicos da análise para obter um resultado na análise da gasolina testada.

Conclusão

O presente trabalho objetivou a investigar a aplicação de um modelo de análise paraconsistente para tomada de decisão para apontar o grau de evidência, o grau de acerto e consequentemente o melhor resultado obtido em análises Raman feitas em amostras de gasolina tipo C. Conclui-se que a técnica de análise com a LPA2v permitiu que se observasse a importância do tempo de ocorrência, definindo-se como o mais otimizado de de 5 segundos. A observação desse valor relacionado ao tempo de ocorrência foi fundamental para obtenção do resultado final da análise com 100% de acerto.

Referências

1. Da Silva Filho J I, Abe J M e Lambert-Torres G, Inteligência Artificial com as Redes de Análise Paraconsistentes, Teorias e Aplicação.
2. Greenpeace– Greenpeace.org. Acesso em 26 de julho de 2020.
3. Fogaça, J. R.V.. "Classificação e qualidade da Gasolina"; *Brasil Escola*. Disponível em: https://brasilescola.uol.com.br/quimica/classificacao-qualidade-gasolina.htm. Acesso em 26 de julho de 2020.
4. Bezerra C. M, Oliveira Silva D, Matos G H M et al. Quantification of anhydrous ethanol and detection of adulterants in commercial Brazilian gasoline by Raman spectroscopy. Instrumentation Science & Technology, 47:1, 90-106, DOI: 10.1080/10739149.2018.1470535