



Universidade Federal da Bahia

Escola Politécnica da Bahia

Programa de Pós-Graduação em Mecatrônica

Carlos Eduardo Tanajura da Silva

**CLASSIFICAÇÃO TIPO/TITULAÇÃO DE ÓLEOS ALIMENTÍCIOS POR
FLURIMETRIA E REDES NEURAIIS**

Salvador – BA

2014

Carlos Eduardo Tanajura da Silva

**CLASSIFICAÇÃO TIPO/TITULAÇÃO DE ÓLEOS ALIMENTÍCIOS POR
FLUORIMETRIA E REDES NEURAIS**

Trabalho apresentado ao Programa de Pós-Graduação em Mecatrônica, programa conjunto entre o Departamento de Engenharia Mecânica e o Departamento de Ciência da Computação, da Universidade Federal da Bahia como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Mecatrônica.

Orientador: Prof. Dr. Iuri Muniz Pepe.

Membro da Banca: Prof. Dr. Modesto Antônio Chaves.

Membro da Banca: Prof. Dr. Paulo César Machado de Abreu Farias.

Salvador – BA

2014

AGRADECIMENTOS

Primeiro quero agradecer a Deus por sempre estar presente em minha vida e tornar todos os momentos especiais.

Agradecer aos meus pais, João e Marilda, pela dedicação e exemplo que me tornaram a pessoa que sou hoje. A minha irmã, Tathiane (“Chica”), por fazer parte desta caminhada. A minha esposa, Luane, pelo apoio nos momentos de decisões.

Agradecer aos amigos do LaPO, em especial ao meu professor, orientador, amigo, mestre, Iuri Pepe, pelos conselhos tanto para minha vida profissional, quanto para a pessoal. Ao professor e amigo, Vitor Leão, pela oportunidade de fazer parte da “Família LaPO”.

***“As pessoas que sobem neste mundo são as pessoas que se levantam e procuram o que querem, e que, se não o encontrarem, fazem-no” —
Bernard Shaw***

RESUMO

O Brasil destaca-se entre os maiores exportadores de grãos do mundo, sendo assim, cada vez mais surgem novos produtos e derivados destas *Commodity*. Os métodos para classificação desses produtos muitas vezes são custosos e demorados, quase sempre se valendo de técnicas de química analítica e métodos matemáticos como PCA (Principal Component Analysis), PCR (Principal Components Regression) ou PLS (Properties of Partial Least Squares) e RNA (Redes Neurais Artificiais) para aumentar sua eficiência. Devido à grande variedade de produtos são necessários métodos mais eficientes para qualificar, caracterizar e classificar estas substâncias, uma vez que o preço final deve refletir a excelência do produto que chega ao consumidor. Este trabalho propõe uma solução para classificação de óleos vegetais: Canola, Girassol, Milho e Soja colocados no mercado por diferentes marcas e fabricantes. O método de análise empregado é a fluorescência induzida por LED de amostras de óleo diluídas em heptano, com diferentes concentrações, sendo que a classificação dos espectros de fluorescência foi feita por RNA. Foram produzidas e caracterizadas 640 amostras, sendo 480 para treinamento da rede neural e 160 para sua validação. Para a classificação das amostras de fluorescência, os dados foram organizados em dois estudos, o primeiro com referência ao tipo das amostras, o segundo a titulação, este por final contento três arranjos dos dados e RNAs distintas. Na classificação do tipo das amostras, a rede conseguiu identificar 115 amostras, tendo acertado aproximadamente 72% destas amostras de validação. A classificação por titulação, utilizou a metade das amostras de fluorescência, o universo de treinamento passou a ter 240 amostras, as de validação 80. Para esse segundo estudo houve 3 arranjos desses dados, o resultado do primeiro arranjo teve 33 amostras classificadas com sucesso de 80, o segundo 49 e o terceiro 31.

Palavras-chave – Óleo vegetal, fluorescência, RNA.

ABSTRACT

Brazil is one of the biggest exporters of grains in the world. Therefore, there are more and more new grains derived products coming to the market every year, in special vegetable oils. The methods for classification of these products are often costly and time consuming. So as a way to increase its efficiency we often take advantage of techniques for analytical chemistry and mathematical methods such as PCA (Principal Component Analysis), PCR (Principal Components Regression), PLS (Properties of Partial Least Squares) and ANN (Artificial Neural Networks). Due to the wide variety of vegetable oils in the market, more efficient methods are needed to qualify, characterize and classify these substances. Having always in mind that the final price of the oils should reflect the excellence of the product that reaches the consumer. This paper proposes a solution for the classification of the following vegetable oils: Canola, Sunflower, Corn and Soybean. All placed on the market by different brands and manufacturers. The method used was fluorescence induced LED applied to samples of vegetable oil diluted in heptano at different concentrations. Spectra classification was performed by an ANN. 640 samples were produced and characterized, with 480 for the neural network training and 160 for validation. For the classification of the samples of fluorescence, the data were organized in two studies: the first about the kind of samples used, the second used three arrays of data to classify the titration and different ANNs. In the classification of the type of samples, the network was able to identify 115 samples, having settled approximately 72 % of the cases tested. The classification by titration used half of the samples of fluorescence both in the training and the validation. As a result of 80 samples of validation to classify the titration in the second study, the first array had 33 samples successfully classified, the second 49 and third 31.

Keywords: Vegetable oils, Fluorescence, ANN – Artificial Neural Networks.

SUMÁRIO

1 – INTRODUÇÃO	1
1.1 – Trabalhos Realizados	2
1.2 – Objetivo deste trabalho.....	3
2 – FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	4
2.1 – Fluorimetria	4
2.2 – Fluorescência	7
2.3 – Redes Neurais Artificiais (RNA).....	10
2.3.1 – Neurônio Biológico.....	11
2.3.2 – Neurônio Artificial.....	11
2.3.3 – Função de Ativação	12
2.3.4 – Redes Perceptron Multicamadas (PMC).....	16
2.3.5 – Treinamento.....	17
3 – MATERIAIS E MÉTODOS	22
3.1 – Espectrofluorímetro	22
3.1.1 – LED (<i>Ligth Emitting Diode</i>)	26
3.1.2 – CCD (<i>Charge Coupled Device</i>).....	27
3.2 – Elaboração das Amostras.....	28
3.2.1 – Aquisição e tratamento dos dados.....	30
4 – RESULTADOS	36
4.1 – Primeiro estudo “tipo”	36
4.2 – Segundo estudo “titulação”	38
4.2.1 – Primeiro arranjo	39
4.2.2 – Segundo arranjo	44

4.2.3 – Terceiro arranjo	49
5 – CONCLUSÃO	55
5.1 – TRABALHOS FUTUROS.....	56
REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA.....	60
APÊNDICE A.....	62
A.1 – ESPECTROS DE FLUORESCÊNCIA UTILIZADAS PARA TREINAMENTO DA REDE	62
A.2 – DADOS DE ENTRADA PARA TREINAMENTO DA REDE.....	66
APÊNDICE B.....	78
B.1 – ESPECTROS DE FLUORESCÊNCIA UTILIZADOS PARA VALIDAÇÃO DAS REDES	78
B.2 – DADOS DE ENTRADA PARA VALIDAÇÃO DAS REDES	80

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1– Funções de ativação e expressões.....	15
Tabela 3.1 – 24 óleos vegetais para treinamento da RNA.....	28
Tabela 4.1 – Resultado da RNA1 classificando os 4 tipos de óleos vegetais.....	38
Tabela 4.2 – Resultados da RNA2_1 para classificar titulação com resultados de RNA1.	40
Tabela 4.3 – Resultados da RNA2_2 para classificar titulação com resultados de RNA1.	42
Tabela 4.4 – Resultados da RNA2_3 para classificar titulação com resultados de RNA1.	43
Tabela 4.5 – Resultados da RNA2_4 para classificar titulação com resultados de RNA1.	44
Tabela 4.6 – Resultados da RNA3_1 para titulação do tipo Canola.....	45
Tabela 4.7 – Resultados da RNA3_2 para titulação do tipo Girassol.....	46
Tabela 4.8 – Resultados da RNA3_3 para titulação do tipo Milho.....	48
Tabela 4.9 – Resultados da RNA3_4 para titulação do tipo Soja.	49
Tabela 4.10 – Resultados da RNA4 para classificar titulação das 80 amostras.	51
Tabela 4.11 – Resultado dos três arranjos para classificar a titulação.	52
Tabela 4.12 – Configurações e parâmetros após treinamento.....	53

Anexo A

TA. 1 – Dados de Canola (Bom Preço) utilizados para treinar a RNA.	66
TA. 2 – Dados de Canola (Liza) utilizados no treinamento da RNA.....	66
TA. 3 – Dados de Canola (Purilev) utilizados no treinamento da RNA.	67
TA. 4 – Dados de Canola (Qualitá) utilizados no treinamento da RNA.....	67
TA. 5 – Dados de Canola (Salada) utilizados no treinamento da RNA.	68
TA. 6 – Dados de Canola (Sinhá) utilizados no treinamento da RNA.	68
TA. 7– Dados de Girassol (Bom Preço) utilizados para treinar a RNA.	69
TA. 8 – Dados de Girassol (Liza) utilizados para treinar a RNA.	69
TA. 9 – Dados de Girassol (Mazola) utilizados para treinar a RNA.	70
TA. 10 – Dados de Girassol (Qualitá) utilizados para treinar a RNA.....	70
TA. 11 – Dados de Girassol (Salada) utilizados para treinar a RNA.....	71
TA. 12 – Dados de Girassol (Sinhá) utilizados para treinar a RNA.....	71
TA. 13 – Dados de Milho (Bom Preço) utilizados para treinar a RNA.....	72

TA. 14 – Dados de Milho (Liza) utilizados no treinamento da RNA.	72
TA. 15 – Dados de Milho (Mazola) utilizados no treinamento da RNA.	73
TA. 16 – Dados de Milho (Qualitá) utilizados no treinamento da RNA.....	73
TA. 17 – Dados de Milho (Salada) utilizados no treinamento da RNA.....	74
TA. 18 – Dados de Milho (Sinhá) utilizados no treinamento da RNA.....	74
TA. 19 – Dados de Soja (Bom Preço) utilizados para treinar a RNA.	75
TA. 20 – Dados de Soja (Liza) utilizados no treinamento da RNA.....	75
TA. 21 – Dados de Soja (Qualitá) utilizados no treinamento da RNA.	76
TA. 22 – Dados de Soja (Sadia) utilizados no treinamento da RNA.	76
TA. 23 – Dados de Soja (Siol) utilizados no treinamento da RNA.	77
TA. 24 – Dados de Soja (Soya) utilizados no treinamento da RNA.	77

Anexo B

TB. 1 – Dados de Soja (Bom Preço) utilizados na validação da RNA.	80
TB. 2 – Dados de Soja (Qualitá) utilizados na validação da RNA.....	80
TB. 3 – Dados de Girassol (Bom Preço) utilizados para validar a RNA.....	81
TB. 4 – Dados de Girassol (Liza) utilizados na validação da RNA.....	81
TB. 5 – Dados de Milho (Mazola) utilizados na validação da RNA.	82
TB. 6 – Dados de Milho (Salada) utilizados na validação da RNA.....	82
TB. 7 – Dados de Soja (Liza) utilizados na validação da RNA.	83
TB. 8 – Dados de Soja (Soya) utilizados na validação da RNA.....	83

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Espectrofluorímetro UV-Vis Q798FIL.....	2
Figura 2.1 – Decomposição da Luz.	4
Figura 2.2 – Comprimento/Frequência de onda.	5
Figura 2.3 – Espectro Eletromagnético.	6
Figura 2.4 – Espectro Solar.....	7
Figura 2.5 – Esquema que descreve a excitação do elétron.....	8
Figura 2.6 – Elétron salta do nível S0 para S1.	8
Figura 2.7 – Espectro de fluorescência.....	9
Figura 2.8 – Fluorescência de biodiesel [CAIRES, 2008].	10
Figura 2.9 – Componente do neurônio biológico [DA SILVA, 2010].	11
Figura 2.10 – Modelo do neurônio artificial.....	12
Figura 2.11 – Representação da rede Perceptron multicamadas.	16
Figura 3.1 – Diagrama de funcionamento do espectrofluorímetro.....	22
Figura 3.2 – Primeira versão do Espectrofluorímetro Q798FIL.....	23
Figura 3.3 – Segunda versão do Espectrofluorímetro Q798FIL.....	24
Figura 3.4 – Terceira versão do Espectrofluorímetro Q798FIL.....	24
Figura 3.5 – Atual versão Espectrofluorímetro UV-Vis - Q798FIL.....	25
Figura 3.6 – Unidade ótica.....	25
Figura 3.7 – Software FILQuimis.....	26
Figura 3.8 Espectro de luz do LED 382 nm de excitação.	27
Figura 3.9 – Sensor do tipo CCD.....	28
Figura 3.10 – 20 amostra do óleo de soja diluídas com heptano.	29
Figura 3.11 – 24 garrafas usadas para gerar 480 amostras para treinar a RNA.	29
Figura 3.12 – 8 garrafas usadas para gerar 160 amostras para validar a RNA.....	29
Figura 3.13 – Descarte das amostras analisadas.	30
Figura 3.14 – Amostras de óleo vegetal de Canola da marca Bom Preço.....	31

Figura 3.15 – Quatro tipos de óleos vegetais e o LED de 382 nm.	31
Figura 3.16 – Espectros de fluorescência dos óleos de Canola, Girassol, Milho e Soja todos da marca Bom Preço após tratamento matemático.	32

Anexo A

A 1 – Amostras de fluorescência de Canola/heptano usadas no treinamento de RNA.	62
A 2 – Amostras de fluorescência de Girassol/heptano usadas no treinamento de RNA.	63
A 3 – Amostras de fluorescência de Milho/heptano usadas no treinamento de RNA.....	64
A 4 – Amostras de fluorescência Soja/heptano usadas no treinamento de RNA.....	65

Anexo B

B 1 – Amostras de fluorescência de Canola/heptano usadas na validação da RNA.....	78
B 2 – Amostras de fluorescência de Girassol/heptano usadas na validação da RNA.....	78
B 3 – Amostras de fluorescência de Milho/heptano usadas na validação da RNA.....	79
B 4 – Amostras de fluorescência de Soja/heptano usadas na validação da RNA.	79

LISTA DE ABREVIATURAS

RNA	Rede Neural Artificial
LED	Light Emitting Diode
CCD	Charge Coupled Device
CNPq	Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico
FAPESB	Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado da Bahia
QUIMIS	Quimis Aparelhos Científicos
UV	Ultra- Violeta
IV	Infravermelho
PMC	Redes Perceptron Multicamadas
LaPO	Laboratório de Propriedades Óticas
FM	Frequência Modulada
VHF	Very High Frequency
UHF	Ultra High Frequency
SHF	Super High Frequency
EHF	Extremely High Frequency
PMC	Perceptrons Multicouches
EPI's	Equipamentos de Proteção Individual
VETEC	Vetec Química Fina LTDA
MOS	Metal Oxide Semiconductor
ADC	Analog to Digital Converter
CEDETEC	Centro de Desenvolvimento e Difusão de Tecnologias da UESB

LISTA DE SÍMBOLOS

nm	Nanômetro (10^{-9}m)
mm	Micrometro (10^{-6}m)
λ	Comprimento de onda (m)
c	Velocidade da luz (km/s)
ν	Frequência característica
S ₀	Estado Fundamental do elétron
S ₁	Estado Excitado do elétron

1 – INTRODUÇÃO

Em função da grande variedade de marcas e a diversidade de óleos vegetais no mercado brasileiro, muitas vezes não se sabe ao certo se a substância que está sendo comprada é realmente um produto livre de adulteração. Os óleos vegetais possuem características bastante semelhantes entre si, o que dificulta distinguir entre diferentes óleos, tomando apenas as observações: coloração, odor ou sabor. Neste trabalho é proposto uma forma de classificação dos óleos vegetais: Canola, Girassol, Milho e Soja, utilizando RNA – Redes Neurais Artificiais como ferramenta para diferenciar os espectros de fluorescência desses óleos.

Fluorimetria é a caracterização da radiação emitida por uma substância, na forma de um espectro de intensidade em função do comprimento de onda, após ser excitada por uma componente do espectro eletromagnético de mais alta frequência [LEAL, 2009]. A Fluorescência e a fosforescência são fenômenos similares, apesar de diferentes no que diz respeito ao tempo de transição entre os estados quânticos excitado e fundamental [Skoog ET. AL. ,2002]. Na fluorescência, o intervalo de tempo entre a absorção do fóton e a liberação da energia absorvida é praticamente zero, podendo variar entre 10^{-5} s e 10^{-12} s. Na fosforescência esse tempo é bem maior podendo chegar a alguns segundos [SANTOS, 2010].

Nos últimos três anos uma equipe de pesquisadores do Laboratório de Propriedades Óticas (LaPO) da Universidade Federal da Bahia (UFBA), financiados pelo CNPq e FAPESB, em parceria com a empresa QUIMIS, desenvolveram um espectrofluorímetro do tipo LED/CCD. Este equipamento é capaz de obter espectros de fluorescência entre 350 nm e 1050 nm. A patente nacional está no catálogo da QUIMIS sob o código Q-798FIL. A versão comercial do equipamento pode ser vista na Figura 1.1.



Figura 1.1 – Espectrofluorímetro UV-Vis Q798FIL

1.1 – Trabalhos Realizados

Com os protótipos que possibilitaram a versão Q-798FIL foram publicados, na forma de artigos e participação em congresso, os resultados de fluorescência induzida por LED e detectada com o uso de um CCD (charge couple device). Um dos trabalhos publicados foi à utilização de RNA na identificação e determinação da concentração da mistura diesel/biodiesel. Neste primeiro trabalho foi escolhido aleatoriamente um certo número de picos de intensidade de fluorescência como parâmetros de entrada da RNA para classificar tipo/titulação em diferentes concentrações diesel/biodiesel. Este trabalho apresentou resultados satisfatórios. Foram feitas amostras de biodieseis dos tipos: Canola, Girassol, Milho, Soja e Oliva, totalizando 50 amostras em concentrações variando de 10 a 100% de biodiesel em diesel, todas produzidas no LaPO, somente o diesel foi conseguido diretamente da refinaria. Esse procedimento foi adotado para não correr o risco de haver outras substâncias indesejadas diluídas na amostra. Afinal, no diesel vendido comercialmente hoje no país, conhecido como B5, é adicionado 5% de biodiesel de Soja. No primeiro arranjo, para identificar o tipo de biodiesel, a RNA apresentou 90% de acerto para um total de 40 amostras de treinamento e 10 de validação. Já no segundo arranjo, para classificar a titulação do biodiesel em diesel, foi conseguida uma taxa de acerto de 50%. O biodiesel de Oliva, ao ser inserido no universo das amostras, apresentou uma taxa de erro muito elevada, isso devido ao seu espectro de fluorescência, que apresenta um pico intenso centrado em 675nm [FILARDI, 2012].

Em função das dificuldades encontradas no primeiro trabalho em desenvolver um maior número de amostras de biodiesel, para o trabalho de dissertação, foi preparado um novo grupo de amostras e estabelecido novo arranjo dos dados para uma maior compreensão da metodologia desenvolvida. Neste particular, foi criado um total de 640 amostras, produzidas a partir de diluições que variam de 5 a 100% de óleo vegetal em heptano, sendo 480 amostras para o universo de treinamento da RNA e 160 amostras para o de validação. Esse processo será detalhado no capítulo 3, Materiais e Métodos.

1.2 – Objetivo deste trabalho

Desenvolver uma metodologia para classificar por Redes Neurais Artificiais os espectros de fluorescência de amostras de diferentes diluições de óleo vegetal em heptano, em diferentes concentrações. Este método de análise deve ser capaz de extrair a informação mais relevante dos espectros de fluorescência, utilizando-a como parâmetros de entrada de uma RNA, tanto para treinamento da rede, quanto na sua validação classificar as amostras pelo seu tipo e titulação.

2 – FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 – Fluorimetria

A luz visível é uma parte do espectro eletromagnético, cujo o intervalo do comprimento de onda está na região em que o olho humano é sensível. Esta forma de energia é descrita por duas teorias: ondulatória e corpuscular. A teoria ondulatória demonstra a propagação da luz através de dois campos vetoriais um elétrico e outro magnético, que conjugados às cargas elétricas fazem aparecer dois tipos de forças. Essas forças formam a radiação eletromagnética [LEAL, 2011].

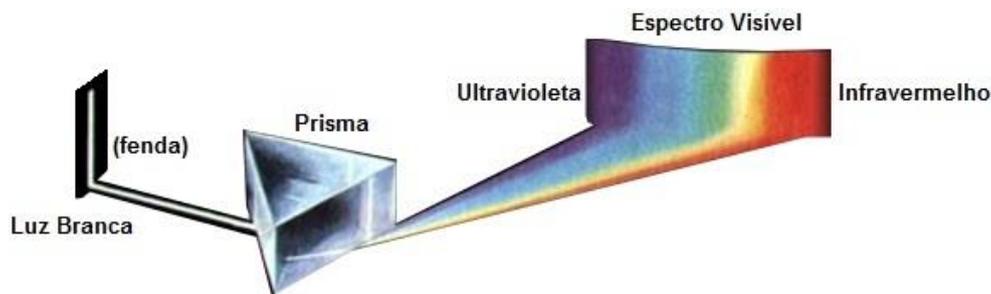


Figura 2.1 – Decomposição da Luz.

A Figura 2.1, ilustra a decomposição da luz branca (luz solar, por exemplo) por um prisma. Este elemento de ótica, por sua geometria e pelo material de que é feito, cujo índice de refração varia com o comprimento de onda, causa a refração dispersiva da luz, fenômeno capaz de separar um feixe de luz branca em suas componentes espectrais [LEAL, 2011].

Para representar os campos eletro e magnético da onda luminosa que se propaga é usada uma teoria baseada em ondas harmônicas, cuja representação matemática são senoides defasadas no espaço, em relação à direção de propagação, de um ângulo igual a π radianos. As ondas senoidais são caracterizadas por uma amplitude ou intensidade (A), uma frequência (ν), ou pelo seu recíproco, o comprimento de onda (λ). A Figura 2.2 ilustra uma onda senoidal e apresenta as relações entre estas grandezas.

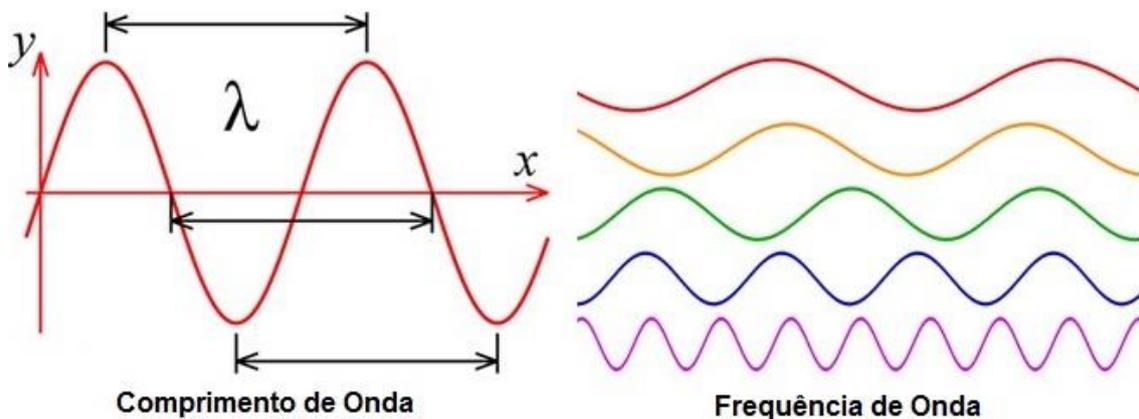


Figura 2.2 – Comprimento/Frequência de onda.

A frequência característica ν e o comprimento de onda λ se relacionam com a velocidade da luz pela equação.

$$c = \lambda \nu$$

Sendo o comprimento de onda λ dado em (m), seu inverso é (m^{-1}), também chamado de número de ondas por unidade de comprimento.

A velocidade de propagação da luz no vácuo (c) é aproximadamente igual a $3.0 \times 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. A luz, qualquer que seja sua frequência ou comprimento de onda, se propaga a esta velocidade no vácuo. Para cada meio a luz tem diferentes velocidades de propagação (água, vidro, ar, etc). Por características próprias do meio, a velocidade da luz no ar é quase a mesma que a sua velocidade no vácuo [LEAL, 2011].

A propagação da energia numa onda senoidal pode ser escrita em função, tanto do seu comprimento de onda, quanto da sua frequência, por exemplo: ondas com menor comprimento de onda transportam mais energia por unidade de tempo.

Como os valores de comprimento de onda da luz visível são pequenos, estes valores de distância são usualmente, expressos em micrometro (μm) (10^{-6}m) ou nanômetro (nm) (10^{-9}m).

A Figura 2.3 ilustra o espectro eletromagnético, e em destaque a região do visível, começando pelo infravermelho próximo (780nm), indo até o ultravioleta (380nm). Esta é a região onde o olho humano é sensível.

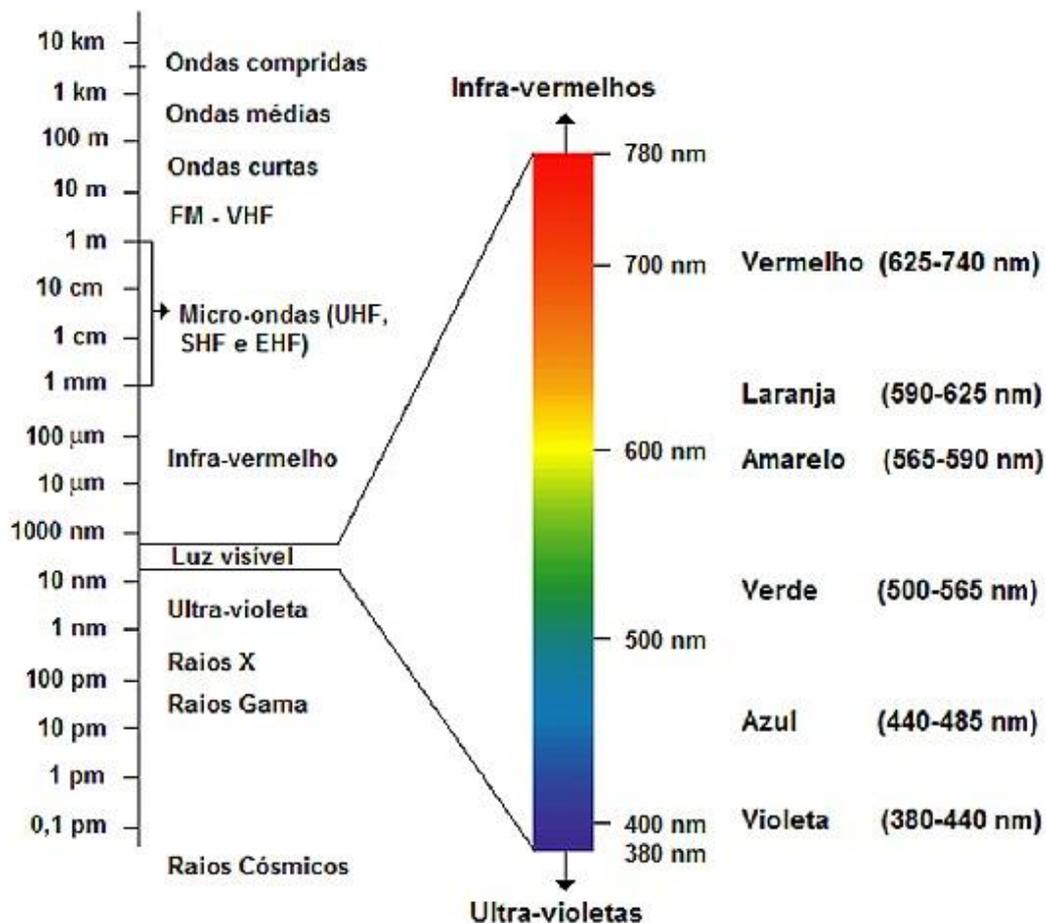


Figura 2.3 – Espectro Eletromagnético.

Dentro desse espectro, algumas bandas despertam maior interesse:

1. A pequena banda denominada luz compreende o conjunto de radiações para as quais o sistema visual humano é sensível [LEAL, 2011].
2. A banda do ultravioleta é formada por radiações com maior quantidade de energia que a luz visível, de menor comprimento de onda, com isso alcança camadas mais profundas da pele, podendo causar queimaduras graves quanto ao tempo exposto a radiação solar [LEAL, 2011].
3. A região dos raios X possui mais energia que a do ultravioleta. Por isso a sua grande aplicabilidade na medicina em radiografias [LEAL, 2011].
4. A radiação da banda infravermelha é de boa parte da luz gerada pelo Sol que chega à Terra, podendo também ser emitida por objetos aquecidos à uma temperatura moderada, como é o caso dos filamentos de lâmpadas incandescente [LEAL, 2011].

5. A radiação, emitida pelo Sol, que ultrapassa a atmosfera, se estende de 190 até cerca de 3000 nm ou 3 μm , essa banda é denominada espectro solar [LEAL, 2011].

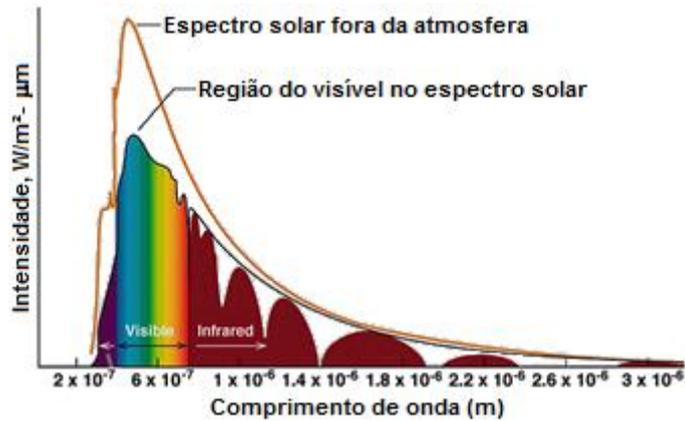


Figura 2.4 – Espectro Solar.

2.2 – Fluorescência

É a capacidade de uma substância absorver fótons em um determinado comprimento de onda e reemitir esta energia luminosa em comprimentos de onda mais longos. Isto, num intervalo de tempo muito curto, sendo esta a diferença básica em relação à fosforescência, pois neste fenômeno o tempo de luminescência é, geralmente, mais longo, podendo levar alguns segundos.

A Figura 2.5 apresenta a mudança de estado de um elétron, que parte de um estado de menor energia para outro de maior energia. Utilizando a luz emitida por um LED como fonte de energia excitante.

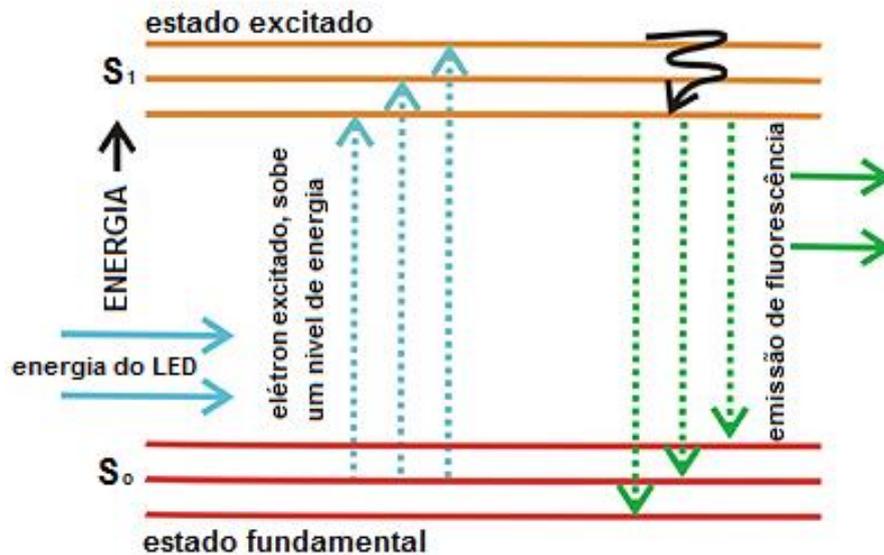


Figura 2.5 – Esquema que descreve a excitação do elétron.

A Figura 2.6 ilustra a mudança do nível de energia do estado fundamental S_0 para o primeiro nível excitado S_1 .

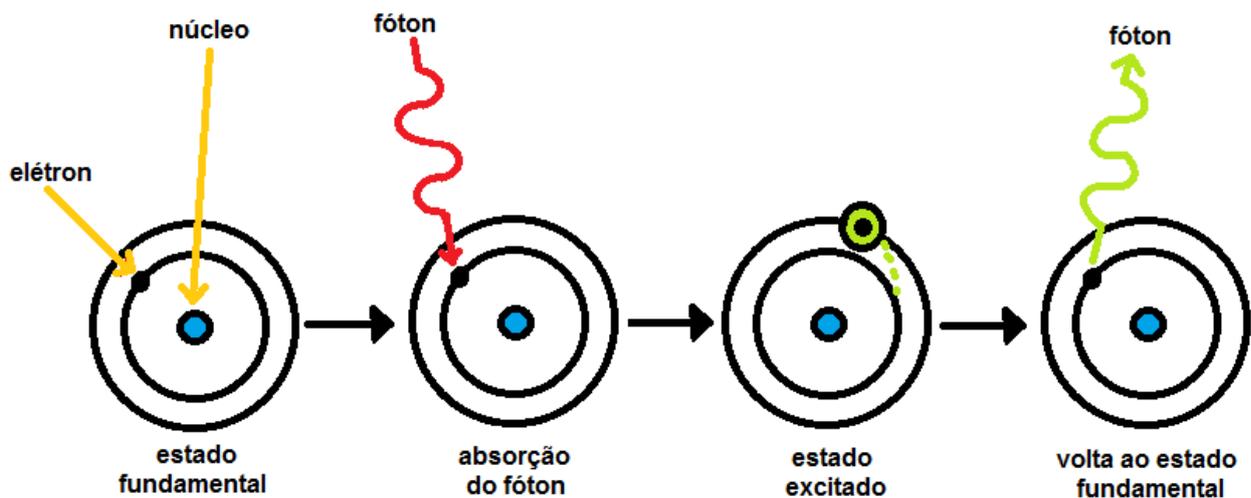


Figura 2.6 – Elétron salta do nível S_0 para S_1 .

A fluorescência ocorre no momento que o elétron retorna ao estado fundamental, mas não na forma de uma transição direta, o elétron responde com a emissão de um fóton de comprimento de onda maior que o da energia de excitação. Ou seja, na transição de des-excitação é emitida uma menor quantidade de energia radiante. Parte da energia de excitação primária é perdida em um processo não radiativo, ou ainda, a des-excitação se dá pela emissão de mais de um fóton. Geralmente os espectros de excitação e emissão são distintos, porém em muitas

vezes ocorre a sobreposição parcial ou, em poucas vezes, pode acontecer a sobreposição completa entre a luz emitida e a luz absorvida por uma dada substância. A Figura 2.7 ilustra esse fenômeno.

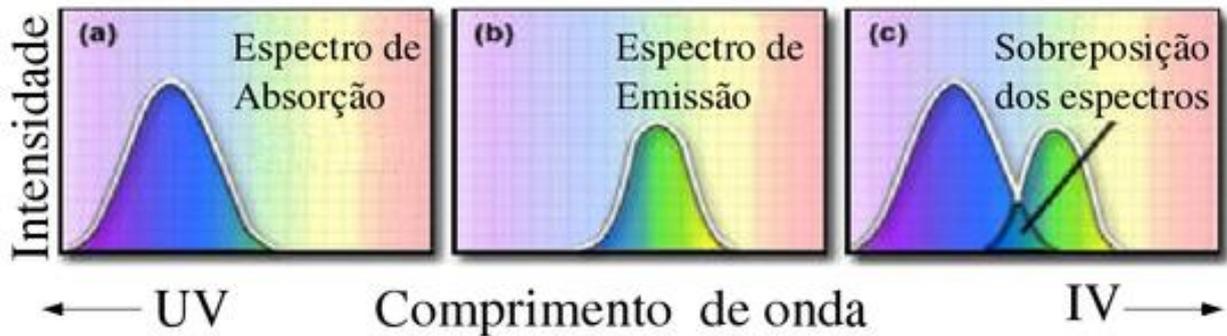


Figura 2.7 – Espectro de fluorescência.

A Figura 2.8 ilustra espectros de fluorescência de amostras de biodiesel em função das lavagens com água destilada (variação da concentração biodiesel/água destilada). O processo foi repetido 3 vezes. As amostras foram excitadas em 400nm. Este trabalho usou 4 amostras de biodiesel [CAIRES, 2008]:

- I biodiesel não lavado (NL);
- II biodiesel após a primeira lavagem (1L);
- III biodiesel após a segunda lavagem (2L);
- IV biodiesel após a terceira lavagem (3L);

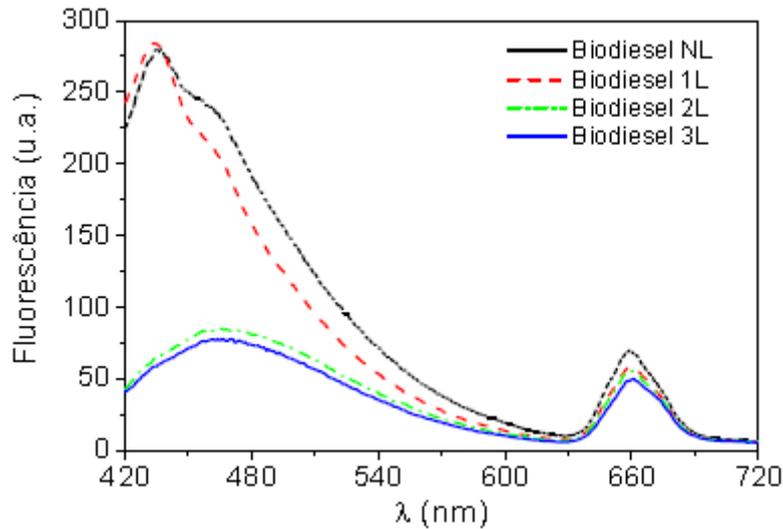


Figura 2.8 – Fluorescência de biodiesel [CAIRES, 2008].

Neste trabalho é perceptível as diferentes variações dos espectros de fluorescência a partir dos diferentes processos de lavagem. As amostras possuem três pontos de grande importância: 435, 470 e 660 nm. No processo é fácil notar a perda do pico de fluorescência em 435, indicando a perda de substâncias presentes na amostra após a segunda lavagem [CAIRES, 2008].

2.3 – Redes Neurais Artificiais (RNA)

Os primeiros modelos referentes a neurônios artificiais foram relatados num trabalho de Warren McCulloch e Walter Pitts, em 1943. McCulloch, que era um psicólogo e neurofisiologista, dedicou sua vida a representar e modelar o sistema nervoso. Pitts, um matemático recém-graduado, juntou-se a ele em 1942, e escreveram o trabalho – “*A Logical Calculus of the Ideas Immament in Nervous Activity*”. Este primeiro trabalho se preocupou mais em apresentar um modelo de um neurônio artificial, assim como sua potencial capacidade de computação, do que, por exemplo, demonstrar as diferentes técnicas de aprendizado [BRAGA 2007].

2.3.1 – Neurônio Biológico

Os neurônios biológicos podem ser, de forma simplificada, divididos em três partes: o *corpo celular*, o *axônio* e os *dendritos*. Estas partes são complementares e cada uma tem sua função [DA SILVA, 2010].

O corpo celular mede cerca de milésimos de milímetros, os dendritos têm a função de receber os impulsos nervosos vindos de outros neurônios e encaminha-los ao corpo celular. As informações são processadas e depois são gerados novos impulsos, encaminhados para outros neurônios através do axônio [DA SILVA, 2010].

Os neurônios são interligados pela conexão do axônio de um e o dendrito de outro, formando assim as *sinapses*. São por elas que os neurônios se unem, formando as redes neurais biológicas. A Figura 2.9 ilustra um neurônio biológico [DA SILVA, 2010].

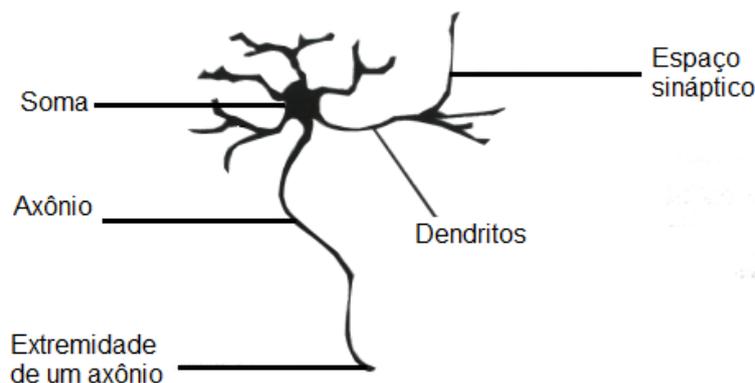


Figura 2.9 – Componente do neurônio biológico [DA SILVA, 2010].

2.3.2 – Neurônio Artificial

O neurônio artificial proposto por MCCulloch e Pitts é uma descrição simplificada do modelo do neurônio biológico. Neste modelo, o neurônio é representado com n terminais de entrada (dendritos), que recebem os valores das variáveis de entrada x_1, x_2, \dots, x_n ; representando as interligações com outros neurônios; e apenas um terminal de saída y , representando o axônio [DA SILVA, 2010].

Na representação das sinapses, os terminais de entrada possuem pesos w_1, w_2, \dots, w_n , cujos valores podem ser positivos ou negativos, dependendo das ações de sinapses que se busca, excitatórias ou inibitórias. Os pesos (w) determinam o grau

de relevância de um dado sinal no disparo da sinapse. θ é o limiar de ativação, esta variável é responsável em gerar valores apropriados de inicialização no intuito de produzir resultados com destino à saída do neurônio [DA SILVA, 2010].

A Figura 2.10 apresenta o modelo de neurônio artificial, o efeito de uma determinada sinapse i é dado pelo produto $x_i w_i$. A soma ponderada das entradas é representada por “soma” e $f(u)$ é a função de ativação, esta função é responsável por gerar as saídas (y) do neurônio, a partir dos vetores \mathbf{x} e \mathbf{w} [BRAGA 2007].

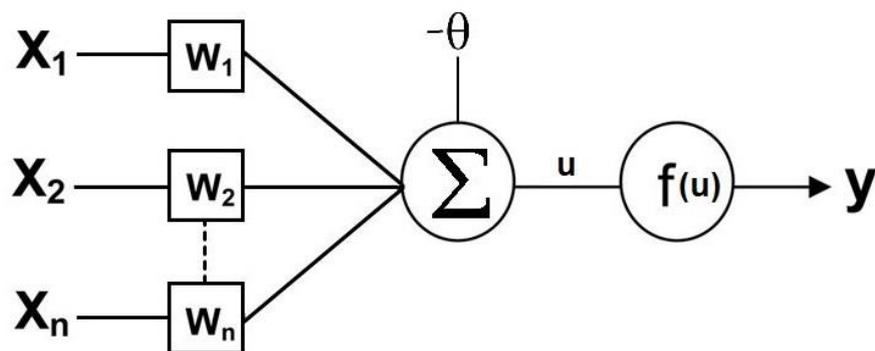


Figura 2.10 – Modelo do neurônio artificial.

As expressões (2.1) e (2.2) representam o resultado proposto pelo modelo do neurônio artificial:

$$u = \sum_{i=1}^n w_i \cdot x_i - \theta \quad (2.1)$$

$$y = f(u) \quad (2.2)$$

Em (2.1) u é o resultado da soma dos valores de entrada com a ponderação dos seus respectivos pesos. Já a expressão (2.2) determina a saída final do neurônio, produzida a partir da função de ativação $f(u)$. A saída y pode também ser utilizada por outros neurônios que estão interligados, isso em função do número de camadas intermediárias que ver a existir numa rede.

2.3.3 – Função de Ativação

As funções de ativação podem ser divididas em dois grupos: funções parcialmente diferenciáveis e funções totalmente diferenciáveis [DA SILVA, 2010].

2.3.3.1 – Funções parcialmente diferenciáveis

São aquelas que possuem curvas de primeira ordem inexistentes. A exemplo delas são:

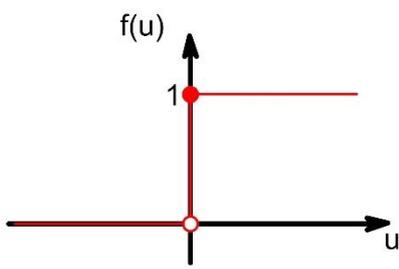
- Função degrau;
- Função degrau bipolar;
- Função rampa simétrica.

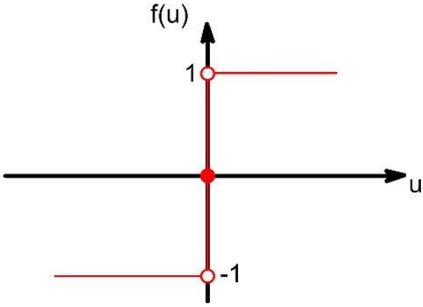
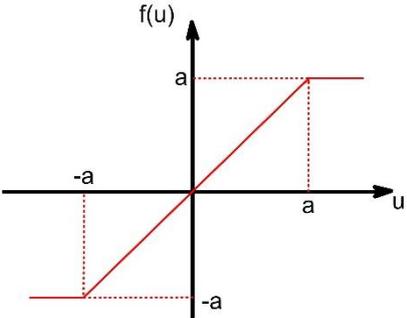
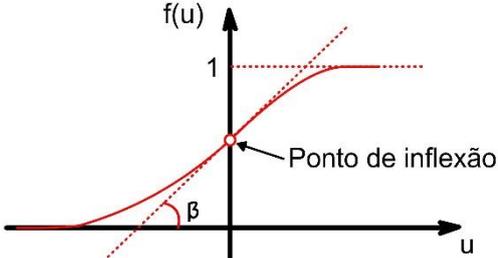
2.3.3.2 – Funções totalmente diferenciáveis

São funções cujas curvas de suas derivadas de primeira ordem existem e são conhecidos os pontos em seu domínio de definição:

- Função logística;
- Tangente hiperbólica;
- Gaussiana;
- Função linear.

A seguir na Tabela 2.1 serão apresentadas as funções de ativação e suas respectivas expressões.

$f(u) =$	Gráfico	Comentários
Degrau $1, \text{ se } u \geq 0$ $0, \text{ se } u < 0$		Valores unitários positivos são atribuídos quando o neurônio recebe potencial maior ou igual a zero, se não, o valor é zero.

<p>Degrau bipolar</p> <p>1, se $u > 0$</p> <p>0, se $u = 0$</p> <p>-1, se $u < 0$</p>		<p>O neurônio recebe valores unitários positivos quando o potencial de ativação for maior que zero, ou nulo para um potencial também nulo. Recebe valor unitário negativo quando o valor de entrada for menor que zero.</p>
<p>Rampa simétrica</p> <p>a, se $u > a$</p> <p>u, se $-a \leq u \leq a$</p> <p>-a, se $u < -a$</p>		<p>São retornados os mesmos valores dos potenciais de ativação quando estes estão no intervalo $[-a, a]$, porém limitando-os nos casos contrários</p>
<p>Logística</p> $\frac{1}{1 + e^{-\beta \cdot u}}$		<p>Assumirá sempre valores reais entre zero e um, onde β é uma constante associada a inclinação da função frente ao seu ponto de inflexão.</p>

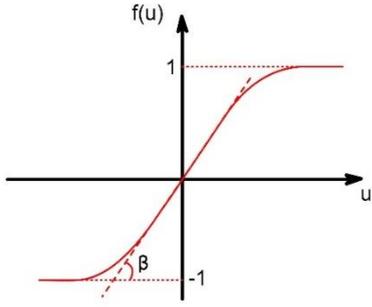
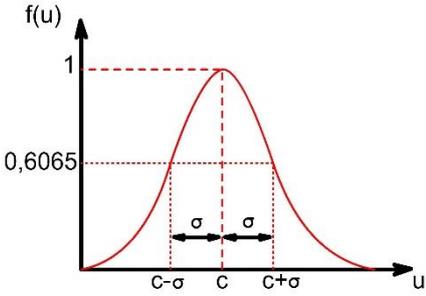
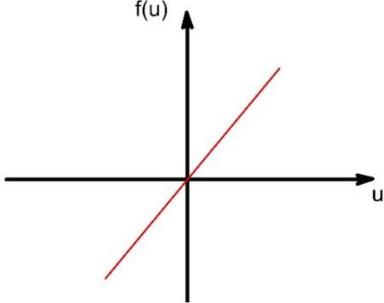
<p>Tangente Hiperbólica</p> $\frac{1 - e^{-\beta \cdot u}}{1 + e^{-\beta \cdot u}}$		<p>Sempre irá assumir valores entre -1 e 1, e o β também está associado ao nível de inclinação da função em relação ao ponto de inflexão.</p>
<p>Gaussiana</p> $e^{-\frac{(u-c)^2}{2\sigma^2}}$		<p>A resposta do neurônio gera valores iguais para {u}, porém a uma mesma distância do seu centro (média), sendo a curva simétrica em relação a este, c é o parâmetro que define o centro da função e σ denota o desvio padrão associado a mesma.</p>
<p>Linear</p> <p>u</p>		<p>Também chamada de função identidade, produz os mesmos valores de saída para valores do potencial de ativação {u}.</p>

Tabela 2.1– Funções de ativação e expressões

2.3.4 – Redes Perceptron Multicamadas (PMC)

Estas redes pertencem à arquitetura *feedforward* multicamadas, que são redes com o fluxo de informação seguindo em uma única direção, ou seja, da camada de entrada em direção à camada de saída. Elas são conhecidas por haver pelo menos uma camada intermediária (escondida) de neurônios. Essas camadas escondidas ficam situadas entre a camada de entrada e a camada de saída da rede [DA SILVA, 2010].

As PMCs dão lugar a um grande número de aplicações em diferentes áreas do conhecimento e se caracterizam tão como pela sua versatilidade. De suas aplicações destacam-se:

- Aproximação de Funções;
- Reconhecimento de Padrões;
- Identificação e controle de processos;
- Previsão de séries temporais;
- Otimização de sistemas.

A Figura 2.11 ilustra um exemplo de rede neural do modelo PMC, com um vetor x de valores com 4 entradas, uma camada de entrada **en** com 4 neurônios, uma camada escondida **e** com 4 neurônios, e uma camada de saída **s** com 2 neurônios.

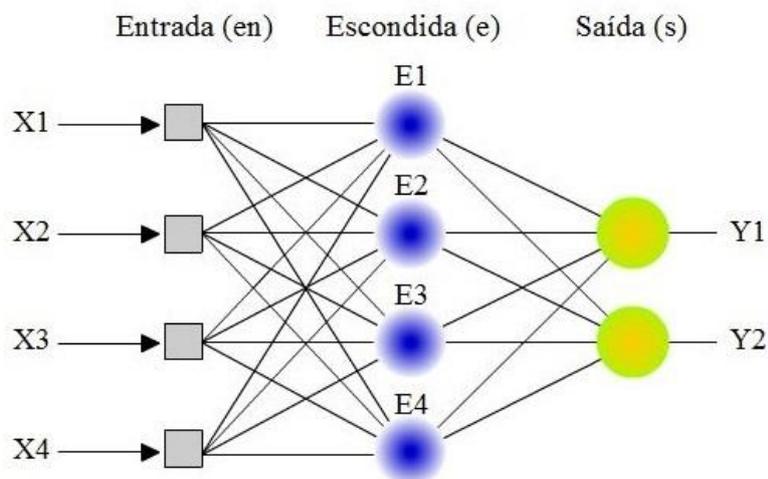


Figura 2.11 – Representação da rede Perceptron multicamadas.

2.3.5 – Treinamento

Neste modelo o ajuste dos pesos e do limiar de cada neurônio é realizado pelo treinamento supervisionado, ou seja, cada informação “amostra” de treinamento que entrar na rede terá uma informação de saída, é o que chamamos de resposta desejada.

O treinamento do PMC utiliza o algoritmo *backpropagation*, que é realizado em duas fases. Na primeira etapa a propagação dos dados de entrada é em direção a camada de saída, passando por todas as camadas intermediárias. Em seguida, os dados de saída são comparados com os dados desejados, é o chamado treinamento supervisionado. O valor do desvio é obtido pela diferença entre os dados da saída da rede e a resposta desejada. Em seguida esta diferença será usada para ajustar os pesos e limiares dos diferentes neurônios [DA SILVA, 2010].

Através dos desvios é realizada a segunda fase do algoritmo *backpropagation*, ou *propagação reversa*. Neste momento são realizadas correções dos pesos e limiares dos neurônios, resultando na redução gradativa da soma dos erros da resposta da RNA, em busca do resultado desejado. [DA SILVA, 2010]

A necessidade de corrigir os pesos dos neurônios da camada de saída é a tentativa de minimizar o erro da resposta da rede em relação à resposta desejada. Cada s-ésimo neurônio da saída corresponde a um determinado valor d-ésimo desejado. [DA SILVA, 2010].

Pelo fato dos neurônios das camadas intermediárias não terem acesso direto aos valores de saída desejado da rede, os ajustes dos pesos são realizados a partir da estimações dos erros produzidos pelos neurônios da camada posterior, cujos pesos também foram ajustados. Ou seja, os pesos da camada de saída são ajustados para que sejam encontrados os valores desejados, como este cálculo encerra certo grau de incerteza, os erros nesta operação são remetidos (propagados) para os neurônios anteriores, e servem para ajustar novos pesos desta camada anterior. Um novo valor de saída é então calculado a partir dos novos pesos sinápticos desta camada posterior e assim por diante de forma recursiva [DA SILVA, 2010]

2.3.5.1 – Ajuste dos pesos sinápticos da camada de saída

Em relação à t-ésima amostra de treinamento, referente ao q-ésimo neurônio da camada de saída e a i-ésima interação do neurônio, o ajuste da matriz dos pesos, $W_{qi}^{(s)}$ da camada de saída é executado empregado a regra de diferenciação em cadeia [DA SILVA, 2010]. Partindo do exemplo de RNA visto na Figura 2.11, tem-se:

$$\nabla E^{(s)} = \frac{\partial E}{\partial W_{qi}^{(s)}} = \frac{\partial E}{\partial Y_q^{(s)}} \cdot \frac{\partial Y_q^{(s)}}{\partial I_q^{(s)}} \cdot \frac{\partial I_q^{(s)}}{\partial W_{qi}^{(s)}} \quad \text{Ajuste dos pesos da camada de saída} \quad (2.3)$$

Em que,

$$\frac{\partial I_j^{(s)}}{\partial W_{qi}^{(s)}} = Y_i^{(e)} \quad \text{Obtido a partir de 2.1} \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial Y_q^{(s)}}{\partial I_q^{(s)}} = f'(I_q^{(s)}) \quad \text{Obtido a partir de 2.2} \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial E}{\partial Y_q^{(s)}} = -(d_q - Y_q^{(s)}) \quad \text{Desvio "erro"} \quad (2.6)$$

$f'(I_j^{(s)})$ é a derivada em primeira ordem da função de ativação. Substituindo (2.4), (2.5) e (2.6) em (2.3), gera a seguinte equação:

$$\frac{\partial E}{\partial W_{qi}^{(s)}} = -(d_q - Y_q^{(s)}) \cdot f'(I_q^{(s)}) \cdot Y_i^{(e)} \quad \text{Ajuste dos pesos de saída com o Desvio}$$

O ajuste dos pesos $W_{qi}^{(s)}$ é efetuado na direção contrária do gradiente, a fim de reduzir o erro, ou seja:

$$\Delta W_{qi}^{(s)} = -\eta \cdot \frac{\partial E}{\partial W_{qi}^{(s)}} \Leftrightarrow \Delta W_{qi}^{(s)} = \eta \cdot \delta_q^{(s)} \cdot Y_i^{(e)} \quad (2.7)$$

η é uma constante, definida como taxa de aprendizagem, e expressa o quão rápido o processo de treinamento da rede converge, chegando à estabilidade. O valor implementado em η é escolhido com cuidado, de forma a evitar a instabilidade do processo de treinamento, por isso em muitos casos é utilizado um valor entre 0 e 1.

Sendo $\delta_q^{(s)}$ o gradiente local do q-ésimo neurônio da camada de saída, sendo dado pela seguinte expressão:

$$\delta_q^{(s)} = (d_q - Y_q^{(s)}) \cdot f'(I_j^{(s)}) \quad \text{Gradiente dos neurônios da camda de saída} \quad (2.8)$$

A expressão (2.7) pode ser reescrita de forma iterativa:

$$W_{qi}^{(s)}(t+1) = W_{qi}^{(s)}(t) + \eta \cdot \delta_q^{(s)} \cdot Y_i^{(e)} \quad \text{Pessos da camda de saída corrigidos} \quad (2.9)$$

2.3.5.2 – Ajuste dos pesos sinápticos da camada escondida

O processo de treinamento consiste em ajustar a matriz de pesos $W_{qi}^{(en)}$, com intuito de minimizar os erros entre a saída produzida pela rede, em função da retro propagação advinda dos ajustes dos neurônios da camada de saída.

$$\nabla E^{(e)} = \frac{\partial E}{\partial W_{qi}^e} = \frac{\partial E}{\partial Y_q^{(e)}} \cdot \frac{\partial Y_q^{(e)}}{\partial I_q^{(e)}} \cdot \frac{\partial I_q^{(e)}}{\partial W_{qi}^e} \quad \text{Ajuste dos pesos da camada de escondida} \quad (2.10)$$

Das definições anteriores tem-se:

$$\frac{\partial I_q^{(e)}}{\partial W_{qi}^{(e)}} = x_i \quad \text{Vetores de entrada dos neurônios da camada entrada} \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial Y_q^{(e)}}{\partial I_q^{(e)}} = f'(I_j^{(e)}) \quad \text{Função de ativação da camda entrada} \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial E}{\partial Y_{qi}^e} = \sum_{k=1}^{n_s} \frac{\partial E}{\partial I_k^{(s)}} \cdot \frac{\partial I_k^{(s)}}{\partial Y_j^e} = \sum_{k=1}^{n_2} \frac{\partial E}{\partial I_k^{(s)}} \cdot \frac{\partial (\sum_{k=1}^{n_s} W_{kj}^s \cdot Y_j^e)}{\partial Y_j^e} \quad (2.13)$$

Em (2.13) o segundo argumento $\frac{\partial (\sum_{k=1}^{n_s} W_{kj}^s \cdot Y_j^e)}{\partial Y_j^e}$, que é o valor da derivada parcial com relação à Y_j^e , é o próprio valor de W_{kj}^s , com isso (2.13) fica da seguinte maneira:

$$\frac{\partial E}{\partial Y_{qi}^e} = \sum_{k=1}^{n_s} \frac{\partial E}{\partial I_k^{(s)}} \cdot W_{kj}^s \quad (2.14)$$

Levando em conta algumas considerações, com base nas informações anteriores, a equação (2.14) pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\frac{\partial E}{\partial Y_{qi}^e} = - \sum_{k=1}^{n_s} \delta_k^s \cdot W_{kj}^s \quad (2.15)$$

Fazendo as substituições de (2.11), (2.12) e (2.15) em (2.10), é gerada a seguinte expressão:

$$\frac{\partial E}{\partial Y_{qi}^e} = - \left(\sum_{k=1}^{n_s} \delta_k^s \cdot W_{kj}^s \right) \cdot f' \left(I_j^{(e)} \right) \cdot x_i \quad \text{Resposta dos neurônios da camada de entrada} \quad (2.16)$$

O ajuste da matriz de pesos W_{kj}^s é efetuado na direção contrária do gradiente no intuito de reduzir o erro, ou seja:

$$\Delta W_{qi}^{(e)} = -\eta \cdot \frac{\partial E}{\partial W_{qi}^{(e)}} \Leftrightarrow \Delta W_{qi}^{(e)} = \eta \cdot \delta_q^{(e)} \cdot x_i \quad (2.17)$$

$\delta_q^{(e)}$ é o gradiente local com relação ao j-ésimo neurônio da camada escondida, sendo assim:

$$\delta_q^{(e)} = \left(\sum_{k=1}^{n_s} \delta_k^s \cdot W_{kj}^s \right) \cdot f' \left(I_j^{(e)} \right) \quad \text{Gradiente da camada de entrada} \quad (2.18)$$

Para uma melhor compreensão a expressão (2.17) pode ser reescrita de forma iterativa:

$$W_{qi}^{(e)}(t+1) = W_{qi}^{(e)}(t) + \eta \cdot \delta_q^{(e)} \cdot x_i \quad \text{Novos neurônios da camada entrada} \quad (2.19)$$

Por fim, o processo de retro propagação é de fundamental importância para a correção dos pesos dos neurônios de uma RNA. Foi visto que a correção começa das camadas mais próximas à saída, indo em direção as camadas mais próximas à entrada. [DA SILVA, 2010]

Sendo assim, é de grande importância criar um modelo generalizado dos dados. Em muitas situações o universo de treinamento de uma RNA é fruto de experimentos, portanto, carregam consigo erros próprios aos processos de medição. Haverá sempre um dilema no que se refere a complexidade na obtenção de um

modelo. O modelo não pode ser de todo rígido, ou seja, se por um lado deve poder modelar os dados fielmente, por outro lado, não pode ser flexível a ponto de modelar o ruído [BRAGA 2007].

Portanto, um equilíbrio entre a rigidez e flexibilidade deve estar no seu dimensionamento. Se sua estrutura for grande, maior será o número de parâmetros livres para ajustes, o que aumenta a flexibilidade. A dificuldade em dimensionar o modelo ocorre no momento de apresentar os dados a RNA. Podendo ocorrer um superdimensionamento das redes, resultando em *overfitting*, ou redes subdimensionadas que levam a uma situação de *underfitting* [BRAGA 2007].

Para evitar o *overfitting*, durante o treinamento deve ser estimado o erro de generalização, o que gera dois grupos de dados: o conjunto de treinamento e o conjunto de validação. O universo de treinamento é utilizado para o ajuste dos pesos da rede, já o de validação, é utilizado para a generalização da rede e assim, poder determinar o melhor modelo [BRAGA 2007].

O critério para que seja interrompido o treinamento pode estar baseado na observação do momento em que a rede começa a incorporar o ruído dos dados, degradando a sua generalização. Apesar desse critério parecer eficaz, há situações em que ele é limitado, por exemplo, quando o conjunto de treinamento é grande. Deve ser ressaltado que o conjunto de validação não pode ser utilizado para o treinamento [BRAGA 2007].

3 – MATERIAIS E MÉTODOS

3.1 – Espectrofluorímetro

O diagrama funcional do espectrofluorímetro está ilustrado na Figura 3.1. Como fonte de luz de excitação foi utilizado um LED (*Light Emitting Diode*). O porta amostras deste equipamento pode receber cubetas nos padrões de 3,5 mL ou lâminas de microscópio, a coleção da luz de fluorescência é feita à 90° em relação à fonte de luz de excitação, a uma distância fixa. O LED emite luz em um menor comprimento de onda sobre a amostra, que por sua vez, emite a luz de fluorescência com maior comprimento de onda. Tanto a luz de fluorescência da amostra, quanto parte da luz espalhada do LED são detectadas pelo sistema óptico do espectrofluorímetro.

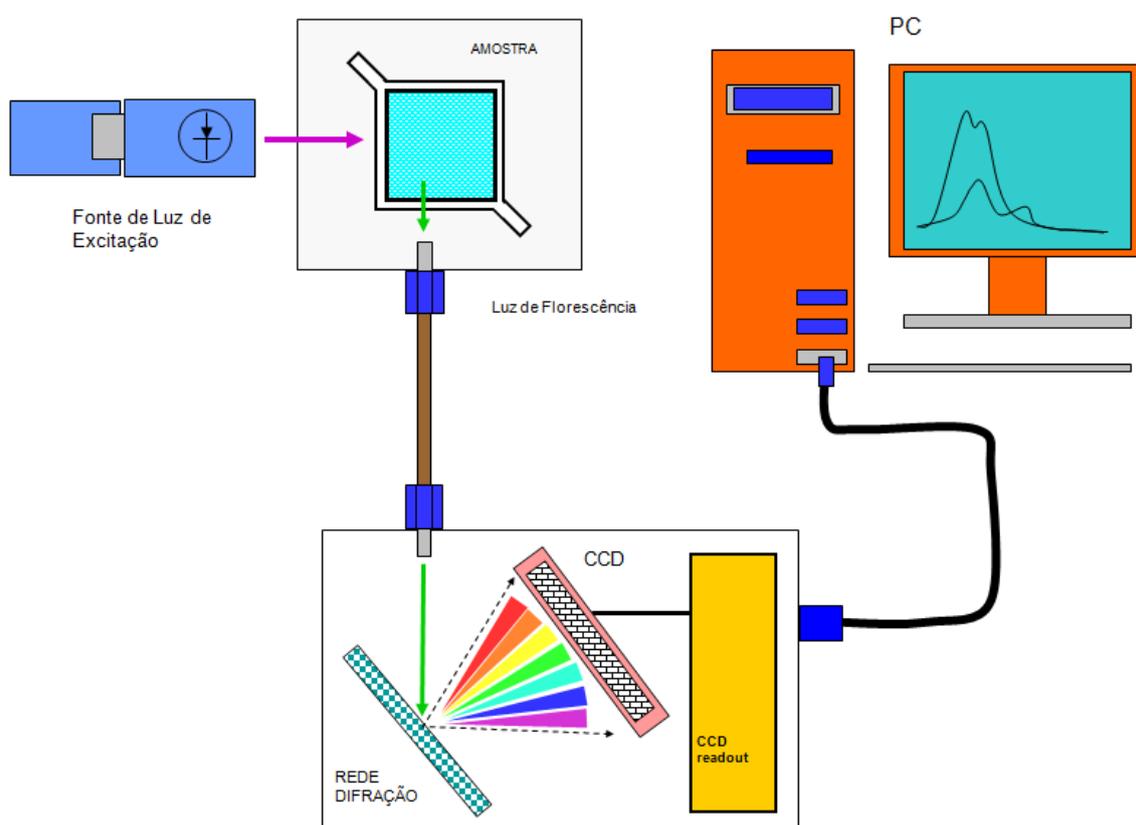


Figura 3.1 – Diagrama de funcionamento do espectrofluorímetro.

O dispositivo sensível à luz é composto de um fotodetector matricial do tipo CCD (*charge coupled device*) de silício com 2048 *pixels*, tendo resposta espectral entre 350 nm a 1000 nm, com precisão de $\pm 1,5$ nm. Sua sensibilidade é de 80 fótons

por contagem do ADC interno de 12 bits, este ADC atribui ao equipamento uma resolução à intensidade de luz de 4096 níveis por pixel, com erro de ± 1 bit.

Hoje o equipamento Q-798FIL se encontra na quarta versão, a Figura 3.2 apresenta a primeira versão, onde uma câmara escura cilíndrica, montada numa base de mármore que servia para isolar a luz externa. Nesta câmara, uma estrutura metálica em perfil de alumínio servia de suporte para a cubeta. A eletrônica ficava fora da câmara, é possível observar a fibra que coletava e transmitia a luz de fluorescência da amostra, além dos cabos de alimentação do LED.

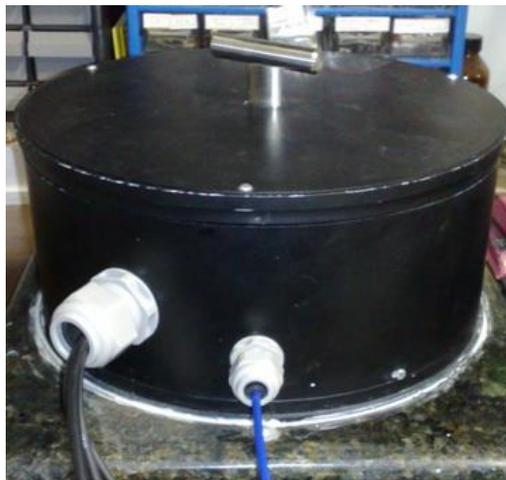


Figura 3.2 – Primeira versão do Espectrofluorímetro Q798FIL.

A segunda versão, como pode ser visto na Figura 3.3, já começa a ter uma aparência de equipamento comercial, a eletrônica e as fiações deixaram de estar expostas. O equipamento recebeu um logo da empresa Quimis e uma abertura para acessar a amostra, que continuava sendo suportada por uma estrutura em perfil de alumínio.



Figura 3.3 – Segunda versão do Espectrofluorímetro Q798FIL.

As amostras de óleos vegetais estudadas neste trabalho foram analisadas na terceira versão do espectrofluorímetro, o equipamento pode ser visto na Figura 3.4. Nesta versão o equipamento incorpora um computador “netbook”, próximo da tampa de acesso à amostra, o que facilita o seu uso e dá mais agilidade ao processo de aquisição dos dados.



Figura 3.4 – Terceira versão do Espectrofluorímetro Q798FIL.

A quarta versão do equipamento é apresentada na Figura 3.5. O computador nesta versão está integrado ao equipamento, possuindo uma placa mãe e processador interno, com entrada e saídas para dispositivos periféricos, tornando o espectrofluorímetro um equipamento completo, compacto e portátil com capacidade de monitorar de forma rápida, não somente a qualidade de óleos vegetais, como também combustíveis: gasolina, biodiesel, diesel, suas misturas e adulterações.



Figura 3.5 – Atual versão Espectrofluorímetro UV-Vis - Q798FIL.

A Figura 3.6 apresenta a unidade ótica do equipamento, é possível ver uma cubeta para amostra de óleo vegetal, antes de ser coletado o seu espectro de fluorescência. É também mostrado a posição do LED a 90° em relação a fibra ótica. Esta por sua vez é responsável em captar a fluorescência da amostra.

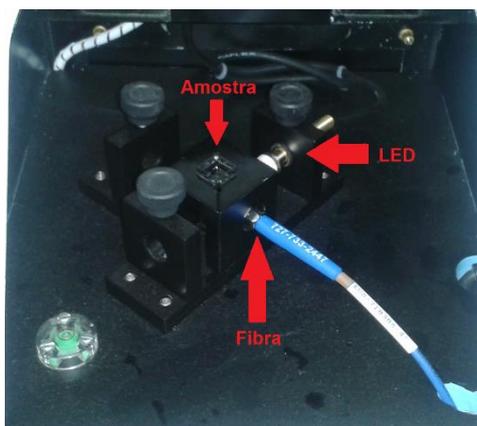


Figura 3.6 – Unidade ótica.

Outros equipamentos que obtêm a fluorescência de maneira clássica utilizam uma fonte de luz extensa, que cobre uma faixa larga do espectro luminoso (UV-visível ou visível-IR). Essa luz passa por uma rede de difração e uma fenda de seleção de modo a obter-se um determinado comprimento de onda, ou alternativamente podem ser utilizados filtros de interferência na seleção da luz de excitação. Na etapa de detecção dos espectrofluorímetros clássicos estão presentes espectrômetros que também utilizam rede de difração, a perda de luz nos elementos de ótica e nas redes de difração, ou nos filtros de interferência, é muito grande, o que obriga o uso de

fotomultiplicadoras frágeis, volumosas e custosas nos equipamentos convencionais. No espectrofluorímetro Q-798FIL a perda de intensidade na ótica é consideravelmente menor, pelo fato deste instrumento usar como detector da luz de fluorescência uma matriz do tipo CCD com resolução de 1.5 nm.

Os espectros de fluorescência das amostras foram adquiridos e estudados utilizando o software FILQuimis, desenvolvido pela equipe de engenharia do LaPO. O software ainda não faz tratamento, análise estatística ou estudos analíticos nos espectros de fluorescência. No entanto, é possível realizar algumas operações simples como soma, subtração, multiplicação e divisão entre espectros ou por uma determinada constante fornecida pelo usuário. Na interface desenvolvida o usuário tem acesso à leitura da intensidade de fluorescência em função do comprimento de onda, entre 339 nm e 1050 nm. A Figura 3.7 representa a tela de execução do software.

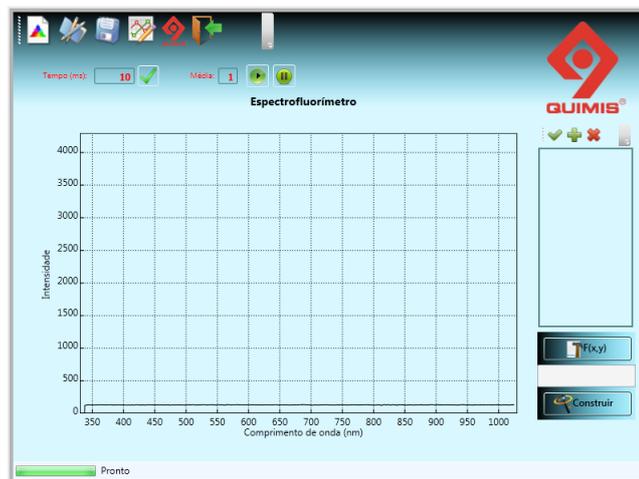


Figura 3.7 – Software FILQuimis.

3.1.1 – LED (*Ligth Emitting Diode*)

Na Figura 3.12 é apresentado o espectro do LED (diodo emissor de luz) de excitação, para tanto foi colocado no porta amostra uma cubeta vazia, ou seja, o equipamento portando nenhuma amostra. A luz que chega a fibra de detecção é a luz espalhada pelas paredes da cubeta. O LED usado como fonte de luz de excitação é fabricado pela Nichia Am. Corp. (part. number NSPu510CS) do tipo ub9, a escolha deste dispositivo em particular deve-se ao fato desta empresa japonesa gozar de muito boa reputação no campo de ótico-eletrônica. O fato de ter sido escolhido um

componente com traçabilidade assegurada, garante não só a qualidade desta fonte de luz, mas também permite a troca standard em caso de manutenção. Este LED apresenta um perfil de emissão quase gaussiano, apresentando uma leve assimetria entre a rampa de início de emissão e a rampa de final de emissão, em relação ao eixo máximo que passa pelo seu ponto máximo de intensidade da curva em forma de sino. Este pico máximo é centrado em 382 nm, com largura de 13.054 nm.

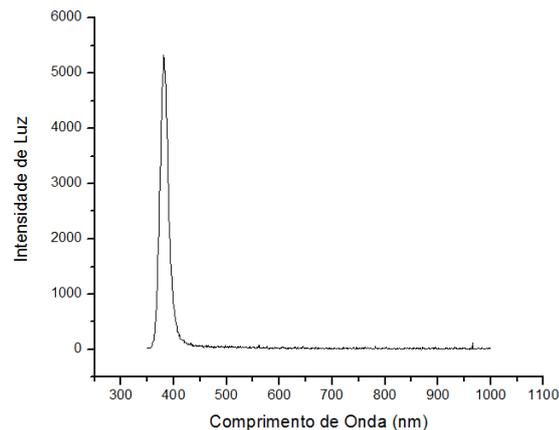


Figura 3.8 Espectro de luz do LED 382 nm de excitação.

3.1.2 – CCD (*Charge Coupled Device*)

O CCD (Dispositivo de carga acoplada) é responsável em captar a decomposição da luz de fluorescência das amostras. Durante os experimentos ele esteve ativo por 1s, período denominado de tempo de integração. O tempo de integração corresponde ao tempo de carga da estrutura MOS de cada pixel do CCD, este “quase” capacitor é carregado a partir dos elétrons liberados pela camada ativa de cada uma dessas micro-células, camada mais exterior onde ocorre efeito fotoelétrico. Esse processo resulta no acúmulo da informação trazida pelos fótons de fluorescência, sob a forma de carga elétrica. Ao termino deste intervalo de tempo o dispositivo (matriz de pixels ou CCD) é esvaziada de seu conteúdo. A tensão acumulada em cada pixel é aplicada à entrada de um ADC (*Analog to Digital Converter*) que transforma o valor da tensão em palavra digital, gerando um vetor de duas dimensões com os dados de comprimento de onda (número do pixel) e a intensidade de luz (quantidade de carga em cada pixel). A Figura 3.9 ilustra um sensor do tipo CCD.

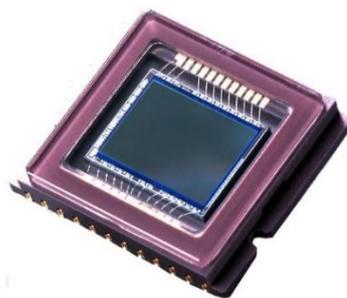


Figura 3.9 – Sensor do tipo CCD

3.2 – Elaboração das Amostras

As amostras foram elaboradas no Laboratório de Propriedades Óticas – LaPO do Instituto de Física da UFBA. Estas foram produzidas respeitando as normas de segurança com a utilização de diversos equipamentos de proteção individual, EPI's. A elaboração das amostras utilizou-se quatro tipos de óleos vegetais, Canola, Girassol, Milho e Soja, de 10 marcas encontradas no comercio local em Salvador-BA. Como pode ser visto na Tabela 3.1.

MARCA	CANOLA	GIRASSOL	MILHO	SOJA
Qualitá	X	X	X	X
Sinha	X	X	X	
Sadia				X
Salada	X	X	X	
Bom Preço	X	X	X	X
Liza	X	X	X	X
Mazola		X	X	
Purilev	X			
Soya				X
Siol				X

Tabela 3.1 – 24 óleos vegetais para treinamento da RNA.

A partir de cada óleo foram produzidas 20 diluições, ver Figura 3.10, gerando 480 amostras para o universo de treinamento da RNA a partir de 24 garrafas, ver Figura 3.11. A metodologia recomenda que o universo de validação possua um total de 25% de amostras com relação ao total do universo de amostras destinadas para treinamento da rede neural. Nesse trabalho foi desenvolvido um pouco mais que isso,

33%. Este universo de validação foi elaborado a partir de 6 marcas porém de lotes diferentes, gerando a partir de 8 garrafas 160 amostras, ver Figura 3.12. Totalizando 640 amostras.



Figura 3.10 – 20 amostra do óleo de soja diluídas com heptano.



Figura 3.11 – 24 garrafas usadas para gerar 480 amostras para treinar a RNA.



Figura 3.12 – 8 garrafas usadas para gerar 160 amostras para validar a RNA.

Cada amostra foi elaborada pela diluição de óleo vegetal em heptano (C_7H_{16}), onde cada amostra continha um volume total de 30 mL de solução variando de 5% em 5% até 100% de óleo vegetal. Somente 3 marcas estudadas comercializam os quatro tipos de óleos encontrados no comercio de Salvador-BA, são elas: Liza, Bom Preço e Qualitá, como pode ser visto anteriormente na Figura 3.10.

As diluições dos óleos foram feitas com o uso de heptano devido seu grande poder de diluição em óleos, além de ter alta pureza e ausência de resíduos, que poderiam contaminar as amostras [SOUZA 2004]. Ademais, este solvente não apresenta fluorescência induzida pela luz de excitação utilizada. O heptano é um

líquido inflamável e de baixa viscosidade, não possui coloração e tem odor comparável ao da gasolina. O heptano usado é comercializado e distribuído pela VETEC sob o código 189, tipo P.A. (Mistura de Isômeros). Para saber mais vide [CESTEB 2012].

Na Figura 3.13 é mostrado um galão de 20 litros onde estão armazenados os descartes das amostras que foram estudadas. Até o presente momento não se sabe o que pode ser feito com esse resíduo, o seu provável destino será postos de combustíveis, porém há um valor cobrado para realizar o descarte.



Figura 3.13 – Descarte das amostras analisadas.

3.2.1 – Aquisição e tratamento dos dados

Na faixa de cobertura do espectrofluorímetro é possível notar a presença do pico de luz do LED em algumas amostras, esta contribuição depende da quantidade de luz de excitação refletida pelas paredes da cubeta, ou pela luz espalhada nos elementos construtivos da unidade ótica, sem interagir com o meio fluorescente. Sendo assim, nas diferentes diluições dos óleos vegetais em heptano, a luz espalhada do LED aparece mais prevalente para pequenas concentrações de óleo. Tal fenômeno pode ser visto na Figura 3.14, nela são apresentados os espectros das amostras de óleo vegetal de Canola, da marca Bom Preço, para diluições de 5% até 100% de óleo vegetal.

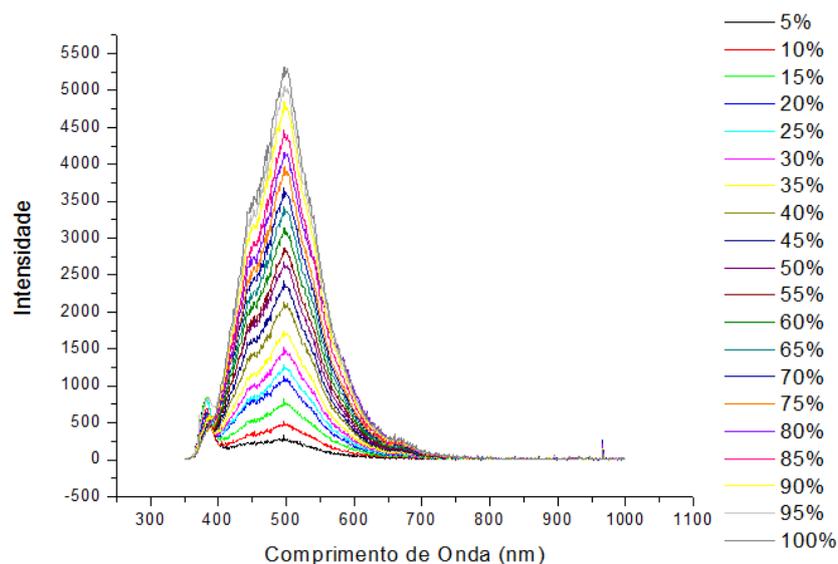


Figura 3.14 – Amostras de óleo vegetal de Canola da marca Bom Preço.

A Figura 3.15 apresenta um conjunto de espectros: O espectro da luz de excitação (LED) centrado em 382 nm e os quatro tipos de óleos vegetais a 100% da marca Bom Preço.

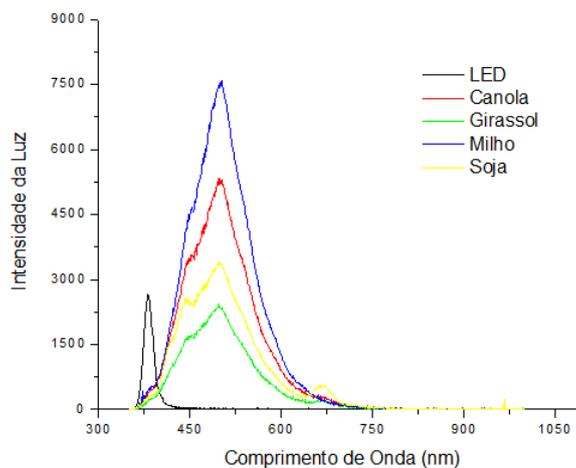


Figura 3.15 – Quatro tipos de óleos vegetais e o LED de 382 nm.

Para o tratamento dos dados experimentais foi utilizado o software Origin 7.0. Para obter o espectro de fluorescência isento da influência da luz do LED, foram realizadas algumas operações matemáticas:

- 1 – Inicialmente o espectro do LED foi subtraído do espectro total (A), desta forma obtém-se fluorescência da amostra (FLU).
- 2 – Depois foi feita a divisão do espectro FLU por uma constante C.

Onde $C = 10.422,95$, ou seja, a maior intensidade de fluorescência obtida para o total das 680 amostras (100% de óleo de Milho da marca Mazola). Esta divisão serve para normalizar os espectros (NOR), facilitando as comparações.

Os espectros foram limitados à faixa que vai de 400 a 700 nm, já que as 680 amostras estudadas não apresentam informação relevante a partir dos 700 nm.

$$FLU = A - LED \quad (1)$$

$$NOR = FLU/C \quad (2)$$

O resultado deste tratamento matemático pode ser visto na Figura 3.15, onde são apresentados um grupo de amostras dos diferentes óleos vegetais utilizados para o treinamento da RNA.

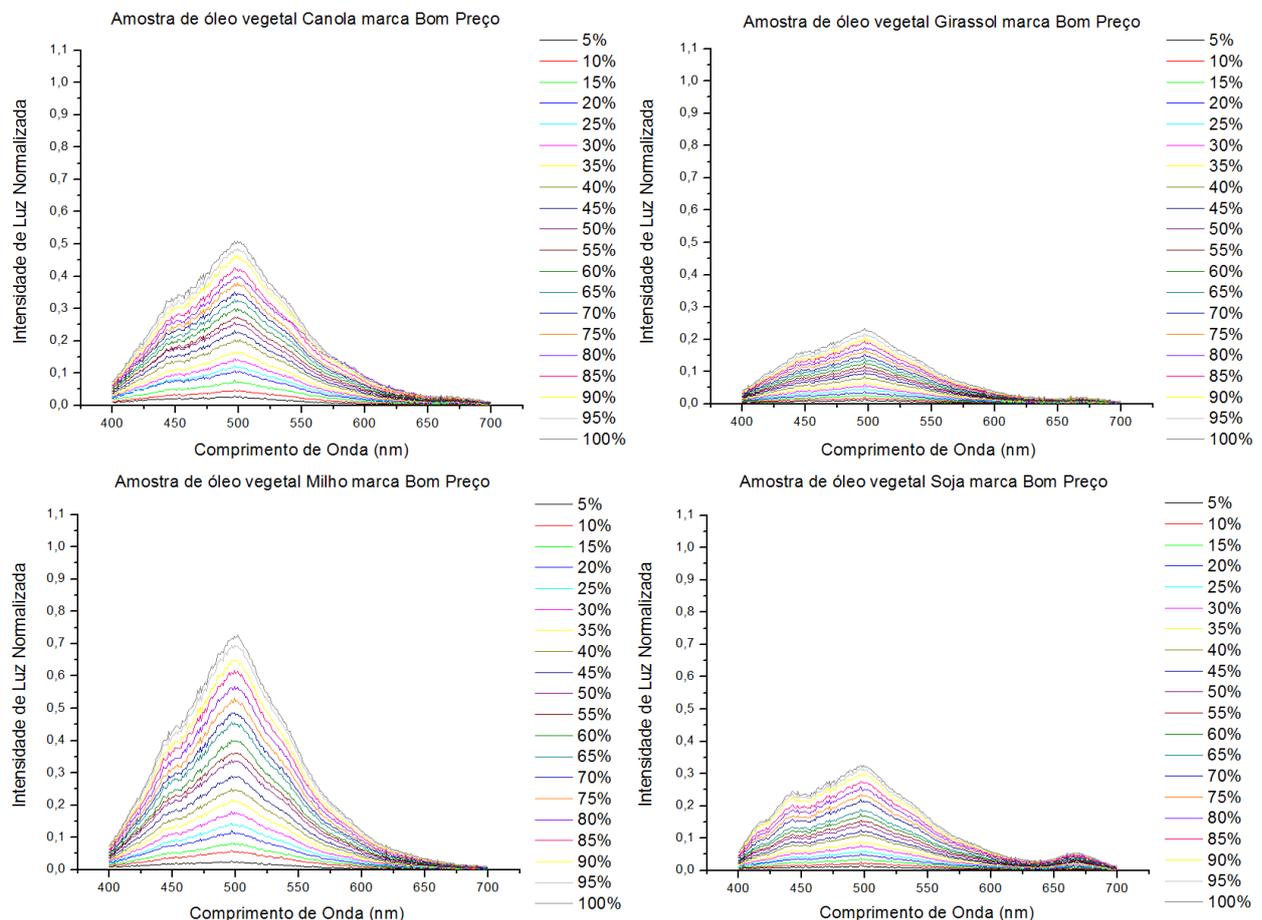


Figura 3.16 – Espectros de fluorescência dos óleos de Canola, Girassol, Milho e Soja todos da marca Bom Preço após tratamento matemático.

Em um trabalho anterior [FILARDI, 2012] utilizou-se o espectro completo das amostras, ou seja, entre 350 e 1050 nm, o tratamento matemático dos dados foi idêntico ao método descrito anteriormente. Ainda neste trabalho, a entrada da RNA utilizou um conjunto de 88 pontos da curva de fluorescência das amostras de biodieseis elaboradas no próprio LaPO. A convergência da rede era muito lenta, chegando a levar horas. Para evitar esta demora, foi elaborado um novo arranjo dos dados utilizados como parâmetros de entrada, onde foi feita uma seleção das características de maior relevância no espectro de fluorescência. A extração das características relevantes foi feita em parceria com o CEDETEC (Centro de Desenvolvimento e Difusão de Tecnologias – UESB), em se valendo de sua experiência em extração de características para o reconhecimento de padrões de substâncias.

Nos modelos de RNAs utilizados para este trabalho de dissertação, o treinamento foi feito utilizando o algoritmo *backpropagation* supervisionado com três camadas: a camada de entrada, uma escondida e a camada de saída. A função de ativação utilizada nos neurônios foi a Tangente Hiperbólica. Para as diferentes configurações de RNA usadas na classificação do tipo/titulação das amostras, foram utilizados diferentes arranjos, no tocante à quantidade de neurônios na camada escondida e da camada de saída [BALABIN 2011]. Porém, o vetor de entrada foi gerado a partir das informações mais relevantes do espectro de fluorescência. Região detectada entre 400 e 700 nm que possibilitou extrair características que possibilitassem distingui-los a partir destas observações. Que são:

- Intensidade da luz de fluorescência em 400 nm;
- Valor máxima da intensidade de fluorescência da amostra;
- Intensidade da luz de fluorescência em 700 nm;
- A soma das intensidades observadas entre 400 e 700 nm;

Segundo [CAIRES, 2008], no espectro de fluorescência do biodiesel as informações de maior relevância estão nos comprimentos de onda: 435, 470 e 660 nm. Neste trabalho, também foram observadas estas regiões do espectro emitido pelas amostras de óleos vegetais comerciais. Observando e comparando os diferentes espectros de fluorescência, chega-se à conclusão que a região que

possibilita distinguir os óleos vegetais deve ser limitada entre 400 e 700 nm. Foi notado que essa área – “soma das intensidades de 400 a 700 nm” do espectro de fluorescência é um bom parâmetro para auxiliar no desempenho da classificação das amostras fluorescência. Visto que estas informações se complementam juntamente com a resposta desejada no processo de treinamento da RNA.

Todas as RNAs utilizam como entrada o vetor x , com as quatro informações de maior relevância. O primeiro estudo utiliza uma rede para classificar o tipo das amostras, ela é composta de uma camada de entrada com 4 neurônios, sendo que o número de neurônios na camada escondida variou no intuito de obter-se o melhor desempenho na classificação das amostras de fluorescência [RAMADHAS 2006]. A quantidade de neurônios na camada de saída representa as diferentes amostras de óleo que a rede pode classificar, ou seja, a saída de cada neurônio assumirá um valor binário 0 (falso) ou 1 (verdadeiro), onde não são permitidas combinações com mais de um neurônio verdadeiro. O primeiro estudo a ser realizado visa classificar o tipo das amostras, a quantidade de neurônios na camada de saída é 4, as situações possíveis são:

- [1 0 0 0] => Canola;
- [0 1 0 0] => Girassol;
- [0 0 1 0] => Milho;
- [0 0 0 1] => Soja.

O segundo estudo foi dividido em três arranjos de dados, gerando assim redes distintas para classificar a titulação das amostras de fluorescência, ou seja, identificar a concentração de óleo vegetal na amostra de 30mL. Estas redes se diferenciam, tanto pela organização de amostras para treinamento, quanto pelo arranjo das RNAs, no que tange o número de neurônios na camada escondida. Nesse estudo foi utilizado o mesmo vetor x de entrada das amostras de fluorescência.

A quantidade de neurônios na camada de saída foi a mesma para cada RNA, 10 neurônios. Onde cada neurônio corresponde a uma titulação:

- [1 0 0 0 0 0 0 0 0 0] =>.10% de óleo vegetal => 3mL de óleo vegetal;

- [0 1 0 0 0 0 0 0 0] =>.20% de óleo vegetal => 6mL de óleo vegetal;
- [0 0 1 0 0 0 0 0 0] =>.30% de óleo vegetal => 9mL de óleo vegetal;
- [0 0 0 1 0 0 0 0 0] =>.40% de óleo vegetal => 12mL de óleo vegetal;
- [0 0 0 0 1 0 0 0 0] =>.50% de óleo vegetal => 15mL de óleo vegetal;
- [0 0 0 0 0 1 0 0 0] =>.60% de óleo vegetal => 18mL de óleo vegetal;
- [0 0 0 0 0 0 1 0 0] =>.70% de óleo vegetal => 21mL de óleo vegetal;
- [0 0 0 0 0 0 0 1 0] =>.80% de óleo vegetal => 24mL de óleo vegetal;
- [0 0 0 0 0 0 0 0 1] =>.90% de óleo vegetal => 27mL de óleo vegetal;
- [0 0 0 0 0 0 0 0 0 1] =>.100% de óleo vegetal => 30mL de óleo vegetal;

As RNAs foram programadas na plataforma MATLAB R2010a, tanto durante o treinamento, quanto na etapa de validação. Aproveitando a flexibilidade e facilidades desta plataforma nos diferentes arranjos e configurações das redes.

Os métodos atuais de controle da qualidade de tais insumos em sua grande maioria não são capazes de apresentar resultados em tempo real, ou com confiabilidade aceitável. Portanto, é de sumo interesse o desenvolvimento de equipamentos e metodologias capazes de determinar, de forma não químico-analítica a qualidade de substancias puras e misturas.

4 – RESULTADOS

Neste trabalho foi utilizado RNAs distintas para classificar diferentes amostras de óleos vegetais diluídas em heptano. Houve a necessidade de organizar os dados das fluorescência em dois estudos. O primeiro estudo utilizou uma rede para classificar o tipo das amostras, ou seja, identificar através dos espectros de fluorescência os tipos: Canola, Girassol, Milho ou Soja. Após este estudo, foi realizado um segundo estudo com intuito de classificar as amostra quanto a sua titulação através de diferentes arranjos dos dados e RNAs para melhor adequação e análise na classificação das diferentes concentrações de óleo vegetal/heptano que são: 3 mL, 6 mL, 9 mL, 12 mL, 15 mL, 18 mL, 21 mL, 24 mL, 27 mL ou 30 mL.

Para uma melhor entendimento dos resultados apresentados nas tabelas seguintes, segue os esclarecimentos logo abaixo:

- A cor azul representa os acertos na validação da rede neural;
- A cor laranja representa a resposta desejada;
- A cor vermelha representa o desvio ou seja o erro;

4.1 – Primeiro estudo “tipo”

A Tabela 4.1 representa as respostas da rede RNA1 (classificar os tipos das amostras de fluorescência) na classificação das 160 amostras para validação da rede, essa por sua vez possui a seguinte configuração: 4 neurônios na camada de entrada, 4 neurônios na camada escondida e 4 neurônios na camada de saída. Em dois casos houve 100% de acerto na classificação dos tipos das amostras, no caso do óleo de Milho da marca Mazola, e do óleo de Soja da marca Liza. O caso mais crítico foi encontrado nas amostras de óleo de Girassol da marca Bom Preço, onde, das 20 amostras, somente 5 foram classificadas com sucesso. A maioria dos espectros de fluorescência referentes aos óleos de Girassol da marca Bom Preço foram classificados como Canola (8/20), enquanto que (7/20) foram classificadas como Soja.

O índice de erro é grande, o que chama a atenção é a simetria do erro, para diluições superiores a 65% de óleo, sistematicamente o óleo de Girassol foi classificado como Canola. Em baixo percentual diluído houve certa alternância no

insucesso, a rede inicialmente acerta (5% e 10%), em seguida erra, acerta novamente por 2 vezes e em seguida erra sistematicamente.

Isso pode ter ocorrido devido à grande similaridade com algum dos lotes utilizados no treinamento. Essa similaridade entre os espectros de fluorescência de Canola e Girassol ocorre pelo fato de que alguns óleos possuem radicais de cadeias carbônicas similares, ou mesmo iguais. Esses óleos possuem como principais compostos o ácido linoleico e linolênico [VIEIRA, 2005], resultando em certa dificuldade na sua classificação por Rede Neural. Isso era esperado pois no decorrer da aquisição dos espectros de fluorescência foi se tornando mais perceptível essa similaridade entre alguns óleos.

Bom Preço	Diluições de óleo vegetal em heptano																			
	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%	95%	100%
Canola	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Girassol	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Milho	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Soja	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 12																				
Qualitá	Diluições de óleo vegetal em heptano																			
	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%	95%	100%
Canola	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Girassol	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Milho	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Soja	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 10																				
Bom Preço	Diluições de óleo vegetal em heptano																			
	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%	95%	100%
Canola	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1
Girassol	1	1	0	1	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Milho	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Soja	0	0	1	0	0	1	1	1	1	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 5																				
Liza	Diluições de óleo vegetal em heptano																			
	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%	95%	100%
Canola	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
Girassol	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0
Milho	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Soja	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 13																				

Salada	Diluições de óleo vegetal em heptano																			
	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%	95%	100%
Canola	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
Girassol	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Milho	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
Soja	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 17																				
Mazola	Diluições de óleo vegetal em heptano																			
	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%	95%	100%
Canola	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Girassol	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Milho	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Soja	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 20																				
Liza	Diluições de óleo vegetal em heptano																			
	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%	95%	100%
Canola	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Girassol	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Milho	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Soja	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Total de Acertos = 20																				
Soya	Diluições de óleo vegetal em heptano																			
	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%	95%	100%
Canola	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Girassol	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Milho	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Soja	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Total de Acertos = 18																				

Tabela 4.1 – Resultado da RNA1 classificando os 4 tipos de óleos vegetais.

Neste primeiro estudo o resultado global foi de 72% de casos com sucesso. Porém vale ressaltar a importância da qualidade das amostras, sendo fundamental a metodologia adotada durante sua coleta e preparação das amostras. Ou ainda a fatores como ajuste da ótica do fluorímetro e parametrização do software de aquisição, que devem permanecer os mesmos durante todo o processo de aquisição dos espectros de fluorescência.

4.2 – Segundo estudo “titulação”

Neste segundo estudo foram realizadas classificações das titulações das amostras: 3 mL, 6 mL, 9 mL, 12 mL, 15 mL, 18 mL, 21 mL, 24 mL, 27 mL e 30 mL. Dessa maneira, das 640 amostras desenvolvidas para este trabalho, neste estudo foi utilizada a metade, ou seja 320, onde 240 amostras foram destinadas para o treinamento e 80 para o universo de validação. Vale apenas ressaltar que são amostras distintas tanto para treinamento quanto para validação. Esta seleção se

deve ao fato da outra metade das amostras não fazer parte do grupo de classificação. Para isso foram realizados três arranjos das amostras para o treinamento e validação dos dados.

4.2.1 – Primeiro arranjo

Para o primeiro arranjo os espectros de fluorescência utilizados para o treinamento foram separados de acordo com seus respectivos tipos, e em seguida organizados de acordo com suas respectivas titulações. Dessa forma as 240 amostras destinadas para treinamento ficaram subdivididas em 4 grupos para classificar a titulação. Deixando cada grupo com 60, sendo assim, cada grupo de 60 amostras foi realizada uma classificação distinta da outra, gerando com isso de 4 redes distintas nomeadas da seguinte maneira:

- RNA2_1 => **Segundo** estudo de classificação do **Primeiro** tipo “Canola”;
- RNA2_2 => **Segundo** estudo de classificação do **Segundo** tipo “Girassol”;
- RNA2_3 => **Segundo** estudo de classificação do **Terceiro** tipo “Milho”;
- RNA2_4 => **Segundo** estudo de classificação do **Quarto** tipo “Soja”.

As 80 amostras destinadas a validação deste primeiro arranjo foram organizadas e separadas de acordo com o primeiro estudo. Ou seja, as amostras foram organizadas de acordo a classificação de tipos por RNA1, que são: 18 como Canola, 19 como Girassol, 18 como Milho e 25 como Soja. Essas amostras foram usadas em suas respectivas RNAs de tipo, para classificar sua titulação.

4.2.1.1 – Titulação por RNA2_1 para tipo classificado por RNA1 como Canola

O arranjo de rede RNA2_1 que apresentou melhores resultados contém as seguintes configurações: 4 neurônios na cada de entrada, 12 neurônios na cada camada escondida e 10 neurônios na camada de saída. A Tabela 4.2 representa a resposta da RNA2_1, as 6 amostras de fluorescência da marca Bom Preço que foram classificadas com acerto por RNA1, também obtiveram sucesso em RNA2_1 na classificação por titulação. Das 5 amostras de Canola da marca Qualitá, 3 foram classificadas com sucesso, as outras 2 foram classificadas com diluições próximas do esperado. Já as amostras de fluorescência de Girassol das marcas Bom Preço e Liza não obtiveram sucesso. A única amostra de Milho da marca Salada, classificada

anteriormente pela RNA1 como Canola, teve êxito na classificação por titulação em RNA2_1.

Bom Preço - CANOLA	Resposta da RNA2_1									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
15 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
Total de Acertos = 6										
Qualitá - CANOLA	Resposta da RNA2_1									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
Total de Acertos = 3										
Bom Preço - GIRASSOL	Resposta da RNA2_1									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 0										
Liza - GIRASSOL	Resposta da RNA2_1									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 0										
Salada - MILHO	Resposta da RNA2_1									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
Total de Acertos = 1										

Tabela 4.2 – Resultados da RNA2_1 para classificar titulação com resultados de RNA1.

4.2.1.2 – Titulação por RNA2_2 para tipo classificado por RNA1 como Girassol

A RNA2_2 foi a rede que apresentou melhores resultados na classificação da titulação para as amostras de óleo Girassol, esta rede contava com 4 neurônios na camada de entrada, 8 neurônios na camada escondida e 10 neurônios na camada de saída. A Tabela 4.3 apresenta os resultados da classificação. Todas as amostra de Canola das marcas Bom Preço e Qualitá obtiveram 100% de sucesso em sua titulação. Já as amostras de Girassol das marcas Bom Preço e Liza, somente uma delas, a de 3mL de óleo vegetal de marca Bom Preço, foi classificada com sucesso. Porém as amostras de Milho da marca Salada e Soja da marca Soya, ambas com 3ml de óleo vegetal foram tituladas com sucesso.

Bom Preço - CANOLA	Resposta da RNA2_2									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 4										
Qualitá - CANOLA	Resposta da RNA2_2									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 5										
Bom Preço - GIRASSOL	Resposta da RNA2_2									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 1										
Liza - GIRASSOL	Resposta da RNA2_2									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
6 mL Óleo Vegetal	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 0										

Salada - MILHO	Resposta da RNA2_2									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acerto = 1										
Soya – SOJA	Resposta da RNA2_2									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 1										

Tabela 4.3 – Resultados da RNA2_2 para classificar titulação com resultados de RNA1.

4.2.1.3 – Titulação por RNA2_3 para tipo classificado por RNA1 como Milho

O melhor desempenho conseguido com RNA2_3 foi adotando a seguinte configuração: 4 neurônios na camada de entrada, 14 neurônios na camada escondida e 10 neurônios na camada de saída. Na Tabela 4.4 são apresentados os resultados da classificação de titulação das amostras classificadas como Milho por RNA1. Vale ressaltar que não houve erro na classificação das soluções do tipo Milho pela RNA1. Porém a rede RNA2_3 não conseguiu o mesmo desempenho na classificação das 8 amostras da marca Salada, somente 5 foram classificadas com sucesso. Já as amostras de óleo da marca Mazola a rede teve êxito em classificar 4/10 das amostras utilizadas.

Salada – MILHO	Resposta da RNA2_3									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 5										
Mazola - MILHO	Resposta da RNA2_3									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	1	0	0	0	1	0	0	0	0

18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 4										

Tabela 4.4 – Resultados da RNA2_3 para classificar titulação com resultados de RNA1.

4.2.1.4 – Titulação por RNA2_4 para tipo classificado por RNA1 como Soja

Para classificar a titulação das amostras de fluorescência como Soja pela RNA1, a rede que apresentou melhor desempenho utiliza 4 neurônios na camada de entrada, 8 neurônios na camada escondida e 10 neurônios na camada de saída. Na Tabela 4.5 é apresentado o resultado de RNA2_4 para a classificação de titulação dos espectros de fluorescência das amostras. Os resultados não foram satisfatórios, pois, de um total de 25 amostras de fluorescência destinadas a classificação, somente 2 casos obtiveram sucesso na classificação por titulação. As amostras classificadas com êxito foram: uma de Girassol e outra de Soja, ambas da marca Liza com 3mL cada. As outras 23 amostras, em sua grande maioria, foram classificadas como diluições muito distantes das esperadas.

Bom Preço - GIRASSOL	Resposta da RNA2_4									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 0										
Liza - GIRASSOL	Resposta da RNA2_4									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 1										
Liza – SOJA	Resposta da RNA2_4									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	1	0	1	0	0	0

12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	1	0	1	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 1										
Soya – SOJA	Resposta da RNA2_4									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 0										

Tabela 4.5 – Resultados da RNA2_4 para classificar titulação com resultados de RNA1.

4.2.2 – Segundo arranjo

O segundo arranjo os dados foram organizados separando-os em seus respectivos tipos. A nomenclatura das redes ficaram organizadas da seguinte forma:

- RNA3_1 => **Terceiro** estudo de classificação do **Primeiro** tipo “Canola”;
- RNA3_2 => **Terceiro** estudo de classificação do **Segundo** tipo “Girassol”;
- RNA3_3 => **Terceiro** estudo de classificação do **Terceiro** tipo “Milho”;
- RNA3_4 => **Terceiro** estudo de classificação do **Quarto** tipo “Soja”.

Para o treinamento e validação foi utilizado o mesmo grupo de amostras como no arranjo anterior. Sendo que, em alguns casos, foi usada a mesma configuração da rede no que tange o número de neurônios. As 80 amostras destinadas para validação das redes, foram divididas em 4 grupos de 20 amostras, dos óleos Canola, Girassol, Milho e Soja.

4.2.2.1 – Titulação por RNA3_1 para Canola

Os resultados da RNA3_1 foram obtidos usando 4 neurônios na camada de entrada, 12 na camada escondida e 10 na camada de saída, ou seja, as configurações de RNA3_1 são idênticas a de RNA2_1. Os resultados das classificações de RNA3_2 são apresentados na Tabela 4.6, o desempenho na classificação das amostras por esta rede foram mais assertivo em relação as outras classificações, visto que a marca Bom Preço teve todos os espectros de fluorescência classificados com sucesso. Em 8 amostras da marca Qualitá a rede também obteve sucesso, somente duas amostras de 21mL e 24mL a rede não logrou classificar, porém o valor classificado por ela foi próximo do esperado das 20 amostras utilizadas para validação.

Bom Preço - CANOLA	Resposta da RNA3_1									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
Total de Acertos = 10										
Qualitá - CANOLA	Resposta da RNA3_1									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
Total de Acertos = 8										

Tabela 4.6 – Resultados da RNA3_1 para titulação do tipo Canola.

4.2.2.2 – Titulação por RNA3_2 para Girassol

Para classificar as amostras de fluorescência de Girassol foram utilizados 4 neurônios na camada de entrada, 7 neurônios na camada escondida, um neurônio a menos que em RNA2_2, e 10 neurônios na camada de saída. A rede com um neurônio a menos classificou duas amostra de fluorescência de Girassol a mais que a rede descrita anteriormente. Tendo, 5 casos de sucesso na classificação das amostras de Girassol da marca Bom Preço, sendo que neste grupo a amostra de 24 mL teve resposta discrepante. Para as amostras da marca Liza a rede conseguiu classificar com sucesso 6 das 10 amostras, sendo que nos 4 casos de classificação incorreta a RNA3_2 classificou 2 amostras (12 mL e 18 mL) com valores discrepantes. Os resultados da rede RNA3_2 são apresentados na Tabela 4.7.

Bom Preço - GIRASSOL	Resposta da RNA3_2									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
Total de Acertos = 5										
Liza - GIRASSOL	Resposta da RNA3_2									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
Total de Acertos = 6										

Tabela 4.7 – Resultados da RNA3_2 para titulação do tipo Girassol.

4.2.2.3 – Titulação por RNA3_3 para Milho

Como a rede RNA1 não classificou nenhuma outra substâncias como Milho e tendo ocorrido erro somente em 3 amostras de Milho da marca Salada, foi utilizada a mesma rede, com o mesmo grupo de amostras para treinamento de RNA3_3. No grupo de amostras para validação desta configuração de rede foram adicionadas duas amostras de 6mL e 30mL de Milho da marca Salada. Note-se que, a rede RNA3_3 ficou com as mesmas configurações que RNA2_3, com 4 neurônios na camada de entrada, 14 neurônios na camada escondida e 10 neurônios na camada de saída. A Tabela 4.8 apresenta o resultado das classificações dos espectros de fluorescência de Milho, as amostras que apresentaram resultados de classificação mais assertivos foram os óleos vegetais da marca Salada, as 10 amostras destinadas para validação por titulação teve êxito em 7 amostras. Das 3 amostras classificadas incorretamente, a amostra de 6mL apresentou um valor discrepante. Já as amostras da marca Mazola somente 4 foram classificadas com êxito, nos 6 casos de insucesso, duas amostras apresentaram titulações discrepantes (6mL e 30mL).

Salada - MILHO	Resposta da RNA3_3									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
Total de Acertos = 7										
Mazola - MILHO	Resposta da RNA3_3									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	1	0	0	0	1	0	0	0	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1

27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 4										

Tabela 4.8 – Resultados da RNA3_3 para titulação do tipo Milho.

4.2.2.4 – Titulação por RNA3_4 para Soja

No treinamento para a titulação das amostras de fluorescência do tipo Soja, a configuração da RNA3_4 que apresentou melhor desempenho utilizou 4 neurônios na camada de entrada, 6 neurônios na camada escondida e 10 neurônios na camada de saída. Além da redução de 2 neurônios na camada escondida, em relação a RNA2_4, esta nova rede obteve maior número de casos de acerto na classificação dos espectros de fluorescência de Milho da marca Liza. Em 10 amostras analisadas, 5 amostras foram classificadas com sucesso sendo 3 com erros próximo do desejado, havendo 2 amostras com resultados. Nas amostras de fluorescência de Soja da marca Soya, 4 das 10 amostras obtiveram resultado positivo e as outras 6 amostras foram classificadas próximo do desejado. A Tabela 4.9 apresenta os resultados de RNA3_4.

Liza – SOJA	Resposta da RNA3_4									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	1	1	1	1	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
Total de Acertos = 5										
Soya – SOJA	Resposta da RNA3_4									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	1	1	1	0	0	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0

24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1
Total de Acertos = 4											

Tabela 4.9 – Resultados da RNA3_4 para titulação do tipo Soja.

4.2.3 – Terceiro arranjo

Para o terceiro arranjo os dados não foram organizados com relação aos tipos de óleo, o treinamento foi realizado separando as titulações em seus respectivos grupos de diluições. Um grupo de 240 amostras foi distribuído em 10 subgrupos de 24 espectros de fluorescência cada grupo, correspondendo as diversas diluições para realizar o treinamento.

As 80 amostras destinadas à validação da RNA foram divididas em 10 grupos de 8 amostras para cada diluição. A rede configurada para classificar este novo arranjo foi nomeada de RNA4 e contava com 4 neurônios na camada de entrada, 9 neurônios na camada escondida e 10 neurônios na camada de saída. Os resultados da classificação de titulação desse terceiro arranjo de espectros de fluorescência estão representados na Tabela 4.10.

Bom Preço – CANOLA	Resposta da RNA4									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	0	1	0	1	0	0	0	0	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1
Total de Acertos = 3										
Qualitá – CANOLA	Resposta da RNA4									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

21 mL Óleo Vegetal	0	0	1	0	0	1	1	0	0	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
Total de Acertos = 4										
Bom Preço - GIRASSOL	Resposta da RNA4									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	1	0	0	0	1	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 4										
Liza - GIRASSOL	Resposta da RNA4									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	1	1	1	0	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
Total de Acertos = 5										
Salada – MILHO	Resposta da RNA4									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	1	0	1	0	0	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	1	0	0	0	0	1	0	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	1	0	0	1	1
Total de Acertos = 5										

Mazola - MILHO	Resposta da RNA4									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	1	0	1	0	1	1	0	0	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1
Total de Acertos = 3										
Liza – SOJA	Resposta da RNA4									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	0	1	0	0	1	1	1	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 1										
Soya – SOJA	Resposta da RNA4									
	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
3 mL Óleo Vegetal	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0
6 mL Óleo Vegetal	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
9 mL Óleo Vegetal	0	0	1	0	1	1	0	0	0	0
12 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
15 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0
18 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
21 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
24 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
27 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30 mL Óleo Vegetal	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Total de Acertos = 2										

Tabela 4.10 – Resultados da RNA4 para classificar titulação das 80 amostras.

Nesse terceiro arranjo houve a grande dispersão na classificação das amostras de fluorescência no que diz respeito à titulação. A maior parte das amostras classificadas não obtiveram sucesso, isso ocorre devido à grande similaridade das

curvas de fluorescência quando são analisadas sem a separação dos tipos. Pois algumas amostras possuem curvas bastante similares mesmo sendo de tipos e diluições diferentes. Ou seja, uma amostra de Canola de 35% pode ter as mesmas características uma amostra de Girassol de 45%, e assim sucessivamente. Das 10 amostras de cada tipo, algumas apresentaram erros próximos dos resultados esperados. Porém, os resultados apresentados para classificação por titulação foram bastantes discrepantes.

Na Tabela 4.11 é apresentado um resumo dos três arranjos estudados, a tabela foi organizada de acordo o tipo de amostra, o total de amostras usadas na validação das redes, os números de acertos e os números de erros cometidos pelo arranjo da RNA.

Lembrando que no primeiro e no segundo arranjo foram utilizadas redes neurais distintas para validar a titulação de cada tipo de óleo, já no terceiro arranjo foi usada uma rede, treinada somente pelo critério titulação das amostras. Esta última organização e separação das amostras tinha por objetivo uma melhor visualização e desempenho nas classificações. E demonstrar a necessidade em se organizar as amostras de fluorescência pelo seu tipo para classificar a titulação e não somente separando-as por suas titulações.

TIPO/ AMOSTRAS	PRIMEIRO ARRANJO			SEGUNDO ARRANJO			TERCEIRO ARRANJO		
	TOTAL	ACERTO	DESVIO	TOTAL	ACERTO	DESVIO	TOTAL	ACERTO	DESVIO
Canola	18	10	8	20	18	2	20	7	13
Girassol	19	12	7	20	11	9	20	9	11
Milho	18	9	9	20	11	9	20	8	12
Soja	25	2	23	20	9	11	20	3	17
TOTAL	80	33	47	80	49	31	80	27	53

Tabela 4.11 – Resultado dos três arranjos para classificar a titulação.

Os resultados apresentados na Tabela 4.11 demonstram o melhor desempenho do segundo arranjo, esse arranjo é a representação da classificação da titulação das amostras pelos diferentes tipos de óleos. O número reduzido de amostras classificadas com acerto no terceiro arranjo era esperado, uma vez que muitas amostras apresentavam grande similaridade de seus espectros de fluorescência, dificultando a classificação por titulação. Em estudos anteriores se percebeu que a quantidade e a qualidade das amostras influenciam no desempenho da rede, qualidade essa que se refere na capacidade da rede neural de distinguir com

maior sensibilidade, seletividade e precisão as nuances causadas no espectro de fluorescência pelas diferentes taxas de diluição. Sendo assim, o fato de alguns tipos de óleos vegetais possuírem similaridade nos espectros de fluorescência, demonstra a necessidade de arranjo dos dados de tal maneira que sejam separados por tipos para o treinamento da rede neural.

A Tabela 4.12 apresenta as configurações das diferentes redes utilizadas para classificar o título/titulação das amostras de fluorescência. Lembrando que a quantidade de neurônios na camada de entrada são os quatro parâmetros de maior relevância do espectro de fluorescência das amostras para classifica-las quanto seu tipo/titulação.

RNA	Camada Escondida	Camada de Saída	Performance da rede	Gradiente
RNA1	4	4	0.107	5.20E-05
RNA2_1	12	10	0.0233	3.88E-07
RNA2_2	8	10	0.0247	1.04E-04
RNA2_3	14	10	0.0489	3.80E-05
RNA2_4	8	10	0.0247	1.04E-04
RNA3_1	12	10	0.0233	3.88E-07
RNA3_2	7	10	0.0305	1.35E-07
RNA3_4	6	10	0.0501	1.44E-05
RNA4	11	10	0.072	3.58E-07

Tabela 4.12 – Configurações e parâmetros após treinamento.

Todas as redes tiveram a mesma quantidade de iterações 50.000. A coluna na Tabela 4.12 denominada performance da rede, são valores que correspondem ao desvio entre as respostas produzidas pelos neurônios de saída com relação aos respectivos valores desejados.

Além da quantidade máxima de iterações, outra grandeza responsável pelo termino do treinamento da RNA é o gradiente. O menor valor adotado para o treinamento das RNAs foi de 1E-10. As regiões onde o gradiente é pequeno implica nas correções dos pesos, sendo assim, é proporcional ao gradiente. Sendo que o valor default adotado pelo software Matlab é de 1E-5. Valores esses que podem ocasionar a paralisia do treinamento. Uma das técnicas utilizadas para resolver este problema é a limitação dos valores dos pesos a um intervalo pré-estabelecido ou reduzir seus valores iniciais, tal como os limiares [OLIVEIRA, 2008].

Os resultados apresentados nesse trabalho foram próximos aos vistos em outros trabalhos correlatos. Visto que, houve a utilização de técnicas como PCA na classificação das diferentes adulterações nas amostras biodiesel/diesel – PC1 e óleo vegetal/diesel – PC2, os resultados apresentados nestas classificações chegaram a PC1 – 76,87% e PC2 – 20,94% [MEIRA 2011].

5 – CONCLUSÃO

Os resultados apresentados neste trabalho se apresentam promissores, visto que os dados utilizados para classificar as amostras de fluorescência dos óleos foram extraídas a partir das informações mais relevantes do espectro de fluorescência. Sendo que em trabalhos desenvolvidos anteriormente se utilizava o espectro de fluorescência em uma forma mais completa. Dessa maneira possibilita o usuário escolher regiões do espectro de fluorescência que mais lhe convêm no intuito de classificar as amostras perante suas observações “escolhas”.

Esse trabalho parte do princípio de não haver necessidades de utilizar métodos químicos ou reagentes para efetuar estudos das amostras, com isso permitir que o usuário compreenda e venha utilizar o equipamento para estudar o comportamento das amostras através dos espectros de fluorescência, e tenha a liberdade de escolher as informações mais relevantes do espectro de fluorescência. Dessa forma permite ao usuário maior objetividade e clareza na sua análise. A utilização do heptano nesse trabalho serviu como demonstrativo para criar as diferentes diluições “assinaturas” dos espectros de fluorescência, porém vale ressaltar que no primeiro trabalho foi utilizado concentrações diesel/biodiesel. Sendo assim, foi possível demonstrar que é possível classificar amostras de fluorescência pelos seus respectivos espectros de fluorescência, e isso independe da composição das amostras, desde que elas possuem respostas de fluorescência através das diferentes amostras coletadas.

O tratamento matemático realizado nos espectros de fluorescência antes do processo de treinamento da RNA se mostrou importante, visto que os resultados de classificação das RNAs foram mais assertivos. Treinamentos feitos sem esse tratamento prévio levavam a resultados influenciados por dados com valores numéricos de ordem (Ex. valores acima 1000), gerados por conta de aproximações e erros com arredondamento numérico. Por fim, com dados tratados as redes passaram a ter respostas com um maior número de acerto na classificação.

A grande dificuldade nesse trabalho foi gerar um número grande de amostras, por diluição em sequência e colher seus espectros de fluorescência. Não foram raras as vezes que dentro de um grupo de medidas apareceram espectros discordantes do restante do grupo, em alguns casos houveram necessidades de refazer todas amostras de um grupo. Um dos fatores para este tipo de desacordo foi o tempo de

repouso necessário para homogeneizar as amostras (óleo vegetal/heptano) de aproximadamente 24 horas. Esse tempo foi adotado somente pela necessidade de criar um tempo de espera para homogeneizar as diferentes diluições óleo vegetal/heptano, se houvessem amostras que não tivessem a necessidade de seu desenvolvimento, esse tempo não seria determinado.

Os resultados apresentados neste trabalho demonstram uma semelhança quando comparado com outros trabalhos onde são aplicados outros métodos de classificação. Onde as classificações alcançadas por este novo método demonstram resultados expressivos de 73% para classificação dos tipos e num segundo arranjo dos dados os resultados apresentaram 61,2% para classificação das titulações. Há partir dessas informações demonstram a necessidade de estudos mais aprofundados para que as regiões de maior interesse nos espectros de fluorescência sejam escolhidas com maior embasamento e com isso atingir resultados com maior acertos.

A técnica apresentada nesse trabalho demonstra a total liberdade do usuário em selecionar regiões do espectro de fluorescência com maior relevância. É possível demonstrar que os usuários não estão limitados a pontos estáticos do espectro. Dessa forma é possível selecionar mais pontos do que os utilizados nesse trabalho. Sendo assim o usuário não se limita a escolher um número determinado de pontos. Lembrando ele que com o aumento de parâmetros utilizado como entrada para rede neural, acarreta para o aumento do seu tempo de treinamento. E assim sucessivamente para as camadas intermediárias e de saída. Pois o número de interações aumenta de acordo ao número de neurônios utilizados nas 3 camadas.

5.1 – TRABALHOS FUTUROS

A metodologia desenvolvida, que usa vetores de entrada para RNA baseados nos parâmetros de maior relevância do espectro de fluorescência, demonstrou a necessidade em haver estudos sistemáticos para uma maior clareza na caracterização das regiões do espectro visível. Ou seja, estudar as substâncias puras ou variedades químicas que determinam as diferentes faixas do espectro de fluorescência de uma dada amostra, para com isso quantificar a forma de classificação desta amostra.

Desenvolver um sistema integrado com informações do espectro de fluorescência de substâncias puras e misturas, que possa ser utilizado como padrão para analisar e quantificar a presença dessas mesmas substâncias em amostras desconhecidas. Sistema esse, que possa ser acessado através de um banco de dados, permitindo ao usuário realizar atualizações remotas, talvez, em parcerias com agências reguladoras ou empresas certificadoras, que atestem da fidedignidade dessas informações.

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

BALABIN, R. M., LOMAKINA, E. I., Safieva, R. Z. (2011). **Neural network (ANN) approach to biodiesel analysis: Analysis of biodiesel density, kinematic viscosity, methanol and water contents using near infrared (NIR) spectroscopy.** Fuel, 90(5), 2007–2015. doi:10.1016/j.fuel.2010.11.038;

BALABIN, R. M. SMIRNOV, SERGEY V. **Variable selection in near-infrared spectroscopy: benchmarking of feature selection methods on biodiesel data.** Analytica chimica acta, v. 692, n. 1-2, p. 63-72, 29 abr. 2011.

BRAGA, A. de P., De Carvalho, A. P. de L. F., Ludermir, T. B., **Redes Neurais Artificiais teoria e aplicações**, 2º Ed., 2007.

CAIRES, A. R. L., Gomes L. A., D Silva, M. V., Figueiredo, M. S., Andrade, L. H. C., Lima, S. M., Oliveira, S. L. **Avaliação da presença de resíduos no biodiesel através da espectroscopia de fluorescência.** 5º Congresso Brasileiro de Plantas Oleaginosas, Óleos, Gorduras e Biodiesel (2008).

CESTEB. **Companhia Ambiental do estado de São Paulo.** *Ficha de Informação de produto Químico.* Disponível em: <http://sistemasinter.cetesb.sp.gov.br/produtos/ficha_completa1.asp?consulta=1%20-%20HEPTENO>. Acessado em 22 de março de 2012.

DA SILVA, I. N., Spatti, D. H., Flauzino, R. A., **Redes Neurais Artificiais para engenharia e ciências aplicadas**, Ed. 2010.

FILARDI, V. L., Da Silva, C. E. T., Dos Santos, N. A. C., Pepe, I. M., **Sistema de identificação e detecção da concentração da mistura diesel/biodiesel por espectrofluorimetria utilizando rede neural.** XIX Congresso Brasileiro de Automática (2012).

HAYKIN, S. (1999). **Neural Networks: A Comprehensive Foundation**, Prentice Hall.

LEAL, K. Z. **Departamento de Físico-Químico.** 2009. Material Didático. Disponível em: <<http://www.uff.br/fisicoquimica/docentes/katialeal/didatico/didatico.htm>>. Acessado em 28 de novembro de 2011;

MEIRA, M ; Quintella, CM ; Ferrer, TM ; da Silva, HRG ; Guimaraes, AK ; Santos, MA ; Neto, PRD ; Pepe, I.M. **Identification of adulteration of biofuel by addition of residual oil instead of biodiesel to the diesel by total spectrofluorimetry and principal component analysis.** Quimica Nova, 2011, Vol.34 (4), pp.621-624

OLIVEIRA, M. A. de, Montini, A. de A., and Bergmann, D. R.. **Previsão de retornos de ações dos setores financeiro, de alimentos, industrial e de serviços, por meio de RNA e modelos Arima-Garch.** Revista de Administração Mackenzie 9.1 (2008)

RAMADHAS, A. S., Jayaraj, S., Muraleedharan, C., Padmakumari, K. (2006). **Artificial neural networks used for the prediction of the cetane number of biodiesel.** Renewable Energy, 31(15), 2524–2533. doi:10.1016/j.renene.2006.01.009;

SANTOS, D. I. de V.; GIL, E. de S. **Fluorimetria na Análise Farmacêutica: Uma Revisão.** Revista Eletrônica de Farmácia vol VII (1), p 24 – 38, 2010;

SIDDIQUE, M.N.H., Tokhi, M.O. **Training Neural Networks: Backpropagation vs Genetic Algorithms.** International Joint Conference on Neural Networks Addendum, Vol. 4 p 2673 – 2678 jul 2001.

SKOOG, DOUGRAS A.; HOLLER, F. JAMES; NIEMAN, TIMOTHY A. **Princípios de Análise Instrumental.** 5 Ed. Bookman, 2002.

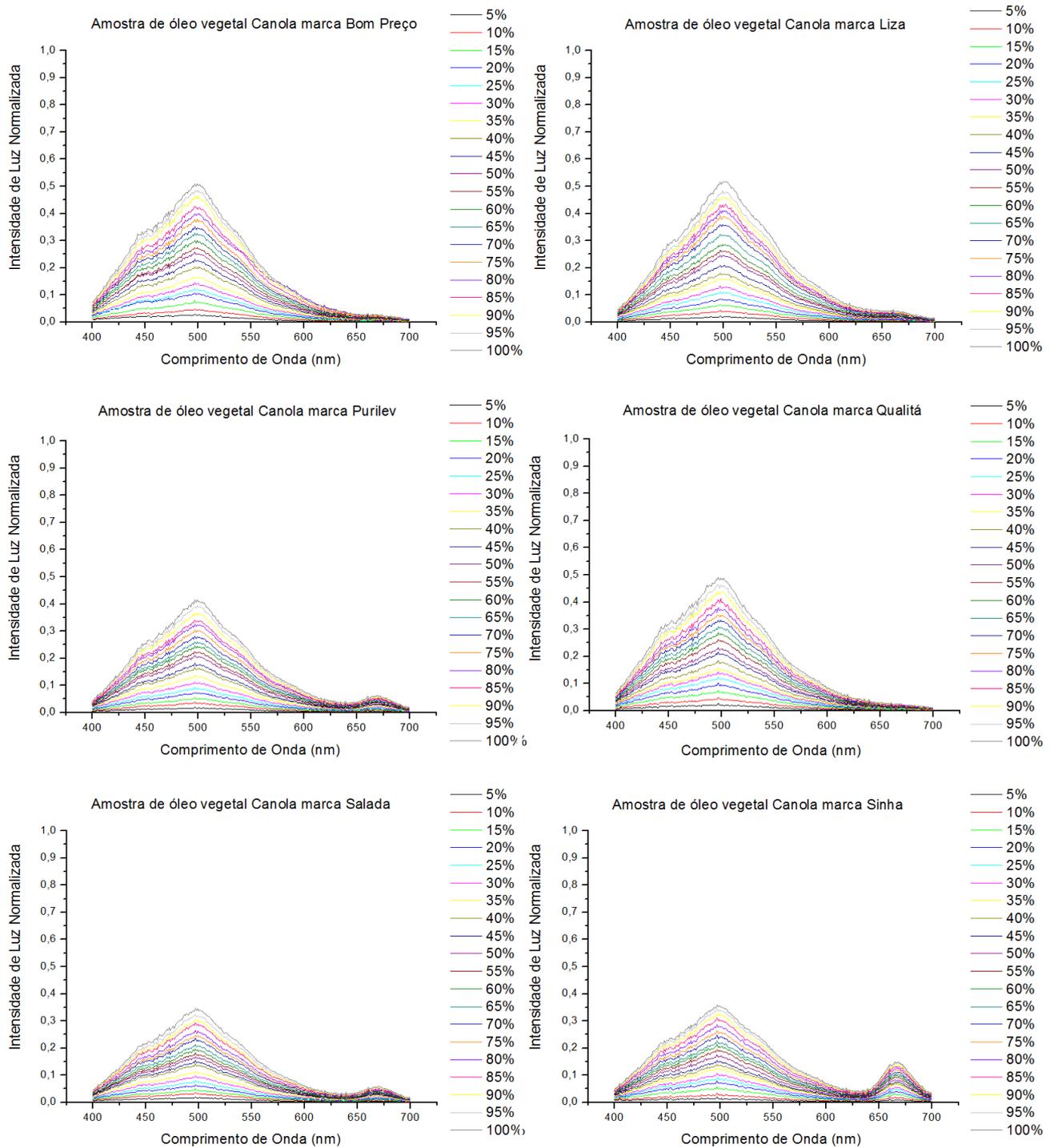
SOUZA J de C., Costa J L. O., De Lim A. A. G., Pontes L. A. M., Guimarães P. R. B., Sobrinho E. V., Vianna R. F., Teixeira L. S. G., **Validação do uso do n-heptano recuperado na análise de goma lavada em gasolina automotiva,** Revista Analytica -Fevereiro/Março 2004 • N° 09.

VIEIRA, F. C. V., Pierre, C. T. e Castro, H. F. (2005). **Influência da composição em ácidos graxos de diferentes óleos vegetais nas propriedades catalíticas de uma preparação comercial de lipase pancreática,** in Unicamp (ed.), VI Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica, pp. 1-6.

APÊNDICE A

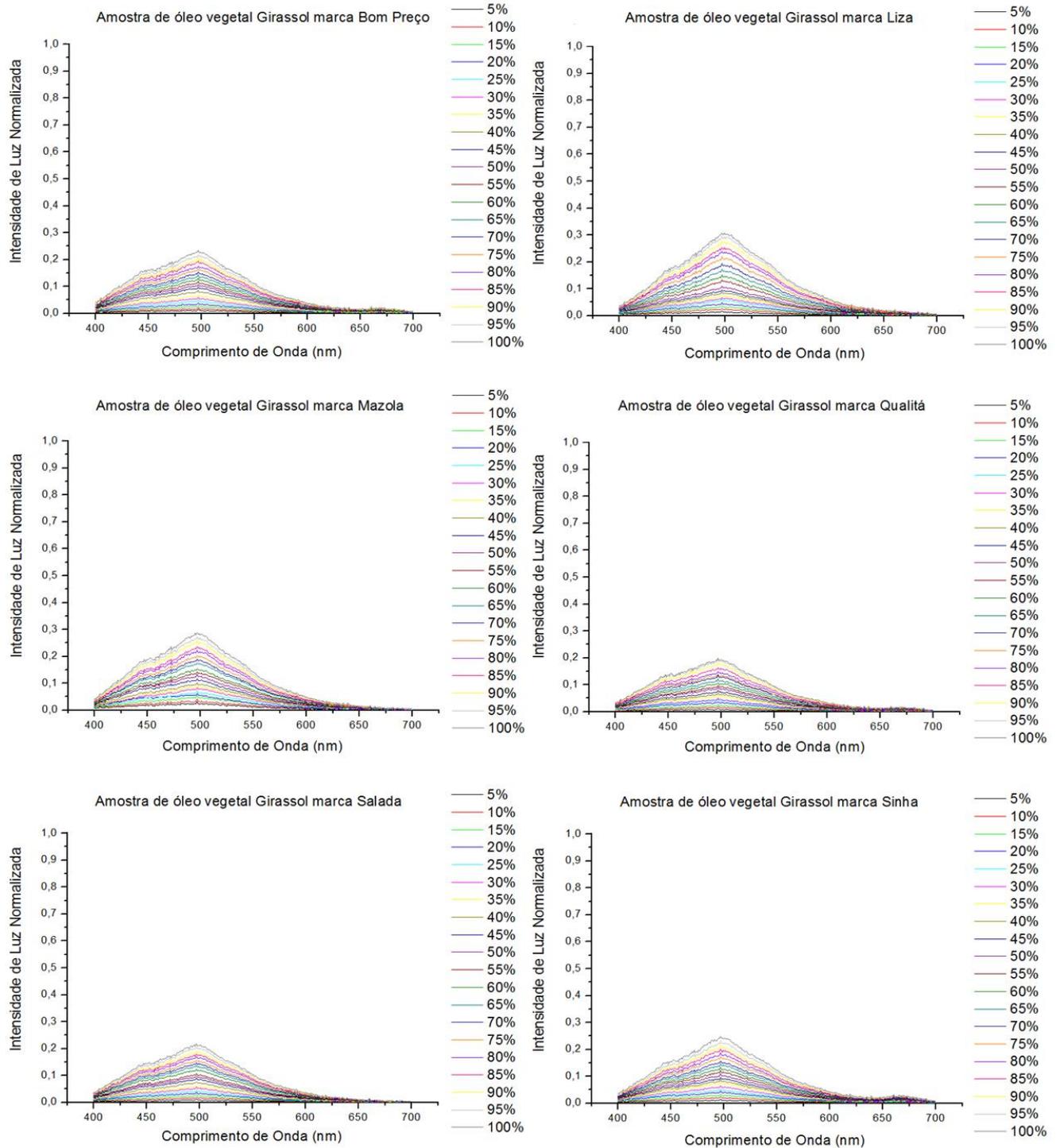
A.1 – ESPECTROS DE FLUORESCÊNCIA UTILIZADAS PARA TREINAMENTO DA REDE

FLUORESCÊNCIA DAS AMOSTRAS DE CANOLA



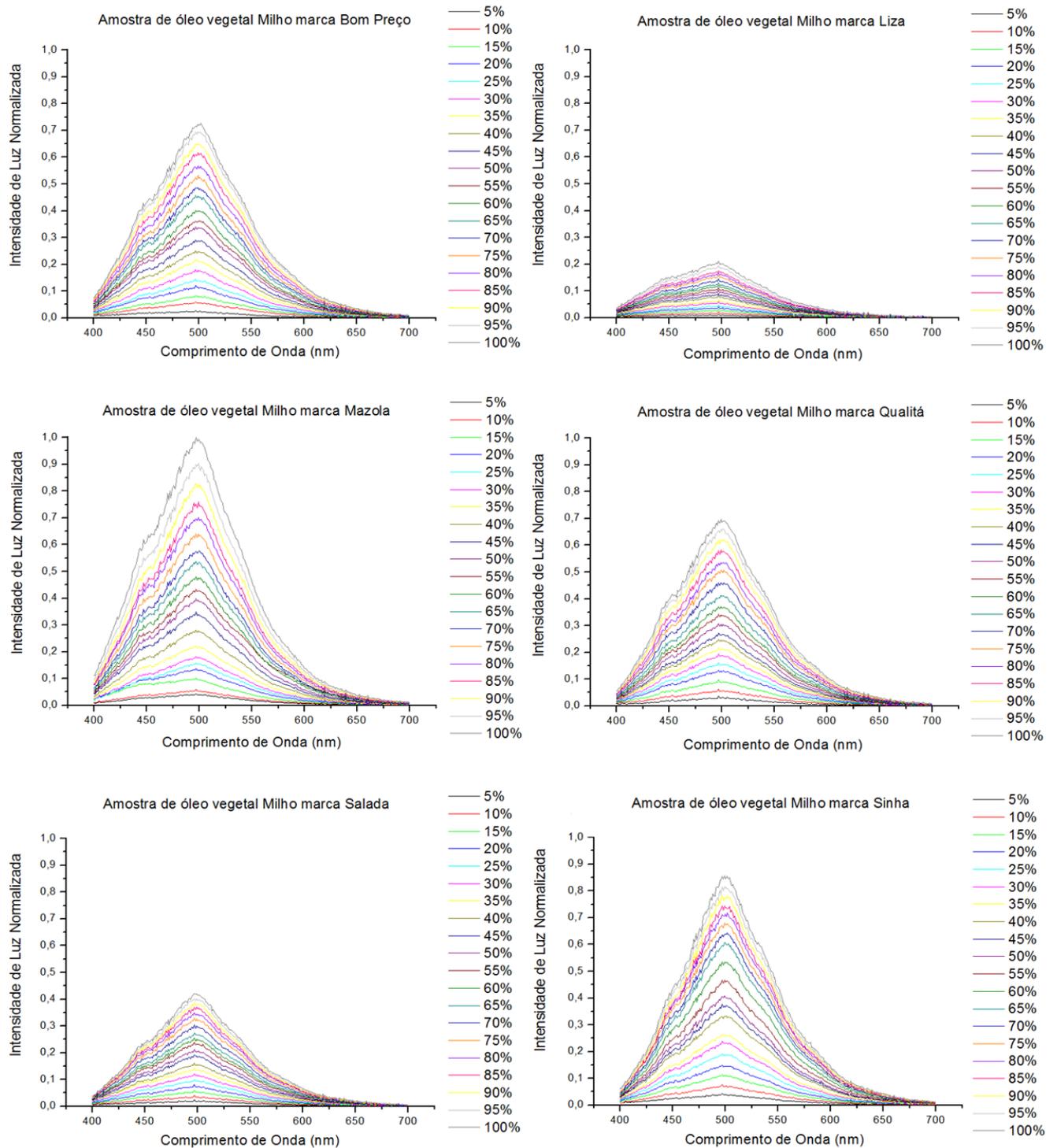
A 1 – Amostras de fluorescência de Canola/heptano usadas no treinamento de RNA.

FLUORESCÊNCIA DAS AMOSTRAS DE GIRASSOL



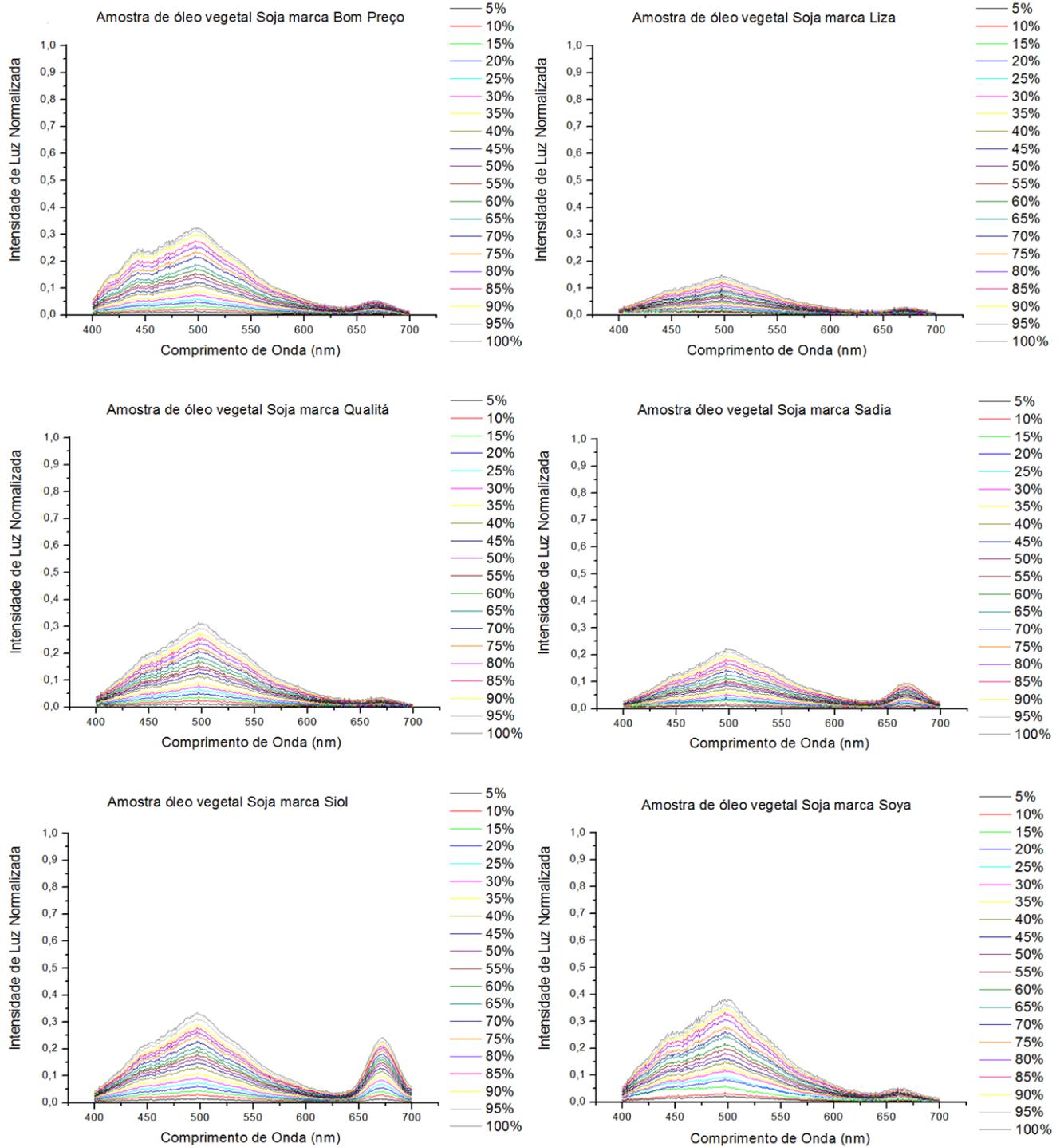
A 2 – Amostras de fluorescência de Girassol/heptano usadas no treinamento de RNA.

FLUORESCÊNCIA DAS AMOSTRAS DE MILHO



A 3 – Amostras de fluorescência de Milho/heptano usadas no treinamento de RNA.

FLUORESCÊNCIA DAS AMOSTRAS DE SOJA



A 4 – Amostras de fluorescência Soja/heptano usadas no treinamento de RNA.

A.2 – DADOS DE ENTRADA PARA TREINAMENTO DA REDE
AMOSTRAS DE CANOLA

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.01059	0.01096	0.01724	0.02357	0.02549	0.02657	0.02889	0.03552	0.03811
ENT_2	0.02989	0.04886	0.07845	0.10735	0.12295	0.14473	0.16731	0.20461	0.23131
ENT_3	0.00138	0.0016	0.00228	0.00323	0.00315	0.00403	0.00389	0.00442	0.00549
ENT_4	3.5056	5.86358	9.19302	13.16124	14.76937	17.43128	20.31208	24.89282	28.03122
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.04401	0.04357	0.04738	0.05249	0.05339	0.05335	0.0575	0.06179	0.06535
ENT_2	0.25712	0.27517	0.30047	0.32769	0.35182	0.38005	0.39922	0.42741	0.46565
ENT_3	0.00563	0.00616	0.0069	0.0067	0.00768	0.00828	0.00964	0.00913	0.01013
ENT_4	31.4831	33.4359	36.8286	39.99157	42.98614	45.58918	50.72795	51.42873	56.03514
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.07343	0.07257							
ENT_2	0.48492	0.51041							
ENT_3	0.01118	0.00972							
ENT_4	58.8575	61.7383							

TA. 1 – Dados de Canola (Bom Preço) utilizados para treinar a RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00359	0.00839	0.00694	0.00973	0.01328	0.01776	0.02256	0.0235	0.02575
ENT_2	0.02343	0.04323	0.06529	0.0855	0.11227	0.13362	0.16138	0.17993	0.20851
ENT_3	0.0012	0.00143	0.00241	0.003	0.00379	0.00338	0.00464	0.00502	0.00581
ENT_4	2.57663	4.99787	7.69509	10.28783	13.33515	15.75258	19.43016	21.60545	25.20742
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.02932	0.02887	0.03113	0.03367	0.03892	0.038	0.03892	0.04027	0.0439
ENT_2	0.24595	0.2644	0.28532	0.32411	0.35981	0.39046	0.4107	0.43372	0.45712
ENT_3	0.00724	0.00722	0.00713	0.00884	0.01022	0.01081	0.01047	0.01038	0.01072
ENT_4	29.7195	31.839	34.6686	38.93321	43.55872	46.28907	48.78214	51.05659	54.64697
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.04324	0.04602							
ENT_2	0.48306	0.51627							
ENT_3	0.01083	0.01387							
ENT_4	57.0701	61.6646							

TA. 2 – Dados de Canola (Liza) utilizados no treinamento da RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00501	0.00692	0.01008	0.01363	0.01801	0.01849	0.01838	0.02358	0.0222
ENT_2	0.02147	0.03928	0.05639	0.07434	0.09305	0.113	0.1375	0.16612	0.18278
ENT_3	0.00108	0.00245	0.0034	0.00439	0.00482	0.00522	0.00673	0.00881	0.00886
ENT_4	2.36589	4.61222	6.72873	9.33121	11.3768	14.01404	16.87608	20.52077	22.34559
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.02693	0.02714	0.03034	0.03319	0.03266	0.03571	0.03714	0.03905	0.04416
ENT_2	0.20981	0.22483	0.24528	0.25974	0.28065	0.30413	0.32595	0.34043	0.36591
ENT_3	0.01044	0.01023	0.0111	0.01284	0.01393	0.01492	0.01546	0.01527	0.01604
ENT_4	26.0846	27.9191	30.6166	32.43756	35.08305	37.87629	40.67019	42.44817	45.86762
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.0444	0.0447							
ENT_2	0.39339	0.41466							
ENT_3	0.01652	0.01942							
ENT_4	48.3284	50.9537							

TA. 3 – Dados de Canola (Purilev) utilizados no treinamento da RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00509	0.00927	0.01417	0.01781	0.02123	0.02248	0.02595	0.02877	0.03441
ENT_2	0.02802	0.04976	0.07459	0.10154	0.12304	0.14305	0.15663	0.18413	0.21535
ENT_3	0.00147	0.00175	0.00234	0.00311	0.00329	0.00364	0.00385	0.00383	0.00532
ENT_4	2.86075	5.48494	8.82987	11.99164	14.7458	17.17795	18.80396	22.06769	26.03812
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.03672	0.03772	0.04188	0.04326	0.04769	0.05222	0.05012	0.05037	0.05887
ENT_2	0.23253	0.26191	0.28927	0.30966	0.33397	0.35202	0.3789	0.41173	0.43808
ENT_3	0.00481	0.00553	0.00668	0.00679	0.00716	0.00768	0.0089	0.00873	0.00855
ENT_4	28.1599	31.8862	34.8712	37.72184	40.92589	43.42125	45.62883	48.85051	53.05399
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.06073	0.06588							
ENT_2	0.46473	0.49167							
ENT_3	0.00996	0.01081							
ENT_4	55.8753	59.234							

TA. 4 – Dados de Canola (Qualitá) utilizados no treinamento da RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00606	0.00909	0.01112	0.01468	0.01704	0.02012	0.02268	0.02617	0.02815
ENT_2	0.02077	0.03624	0.04996	0.06561	0.08064	0.09697	0.11519	0.14224	0.15456
ENT_3	0.00132	0.00228	0.00293	0.00389	0.00457	0.00527	0.00628	0.00756	0.00859
ENT_4	2.38263	4.29742	5.93739	8.11268	9.91599	12.20403	14.31604	17.78688	19.29775
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.0301	0.03151	0.03227	0.0338	0.03639	0.03659	0.0387	0.04039	0.04232
ENT_2	0.16894	0.18188	0.19574	0.21252	0.23577	0.24911	0.26568	0.29202	0.30587
ENT_3	0.00917	0.00996	0.01008	0.01085	0.01191	0.0108	0.01307	0.01449	0.01408
ENT_4	21.3438	22.8639	24.4262	26.38767	29.1665	30.77151	32.87989	36.27747	37.81333
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.0436	0.04565							
ENT_2	0.32385	0.34638							
ENT_3	0.01541	0.01684							
ENT_4	40.269	42.9572							

TA. 5 – Dados de Canola (Salada) utilizados no treinamento da RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00849	0.0104	0.01291	0.01757	0.01885	0.02075	0.02419	0.02735	0.02736
ENT_2	0.02074	0.03541	0.05902	0.07897	0.09427	0.10857	0.12902	0.1411	0.15535
ENT_3	0.00252	0.00372	0.00583	0.00856	0.01014	0.01215	0.01333	0.01515	0.01631
ENT_4	2.31633	4.30493	7.56253	10.48504	12.53885	14.47464	17.48495	19.27498	21.08446
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.02981	0.03149	0.0349	0.0358	0.03919	0.0401	0.04135	0.04318	0.0462
ENT_2	0.17545	0.19554	0.21236	0.22723	0.24745	0.26524	0.28561	0.31087	0.3286
ENT_3	0.01775	0.02016	0.02181	0.02242	0.02483	0.02694	0.0283	0.03047	0.03076
ENT_4	23.9218	26.7234	28.898	30.71917	33.5141	35.90927	38.74285	41.87582	44.51245
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.04786	0.04957							
ENT_2	0.34515	0.35854							
ENT_3	0.03298	0.03321							
ENT_4	46.9309	48.7789							

TA. 6 – Dados de Canola (Sinhá) utilizados no treinamento da RNA.

AMOSTRAS DE GIRASSOL

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00493	0.00645	0.00753	0.0103	0.01191	0.01323	0.01542	0.0169	0.01932
ENT_2	0.01576	0.02204	0.03019	0.03931	0.05021	0.05947	0.06933	0.08545	0.09833
ENT_3	8.97E-04	0.00159	0.00146	0.00167	0.00221	0.00285	0.00303	0.00332	0.00386
ENT_4	1.54602	2.42018	3.44716	4.61835	5.89483	7.13619	8.30461	10.30973	11.99015
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.02115	0.02331	0.02445	0.02557	0.02893	0.03013	0.03171	0.0333	0.03548
ENT_2	0.1086	0.11827	0.1304	0.14195	0.15363	0.16621	0.17605	0.19379	0.20722
ENT_3	0.00381	0.00407	0.00451	0.00508	0.00523	0.00567	0.00633	0.0059	0.00607
ENT_4	13.2391	14.3896	15.8356	17.37694	18.74457	20.46201	21.97008	23.68106	24.87815
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.0375	0.04096							
ENT_2	0.21703	0.23413							
ENT_3	0.00596	0.00672							
ENT_4	26.7124	28.6033							

TA. 7– Dados de Girassol (Bom Preço) utilizados para treinar a RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00609	0.00573	0.00714	0.00897	0.01139	0.01308	0.01332	0.01415	0.01445
ENT_2	0.01717	0.02803	0.03778	0.04824	0.06177	0.06681	0.077	0.08804	0.09674
ENT_3	6.50E-04	0.0012	0.00126	0.00144	0.0015	0.00197	0.00185	0.00253	0.00213
ENT_4	1.88197	3.05823	4.1663	5.46021	6.93252	7.87155	8.95123	10.1882	11.24719
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.01715	0.01815	0.01887	0.02173	0.02249	0.02605	0.0271	0.03004	0.03112
ENT_2	0.11051	0.13412	0.15282	0.17351	0.19359	0.21965	0.2396	0.25414	0.27615
ENT_3	0.00261	0.00339	0.00326	0.00413	0.00398	0.00494	0.00523	0.00518	0.00538
ENT_4	12.7502	15.3861	17.4485	19.95718	22.3699	25.40572	28.1961	29.90702	32.50676
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.03242	0.0368							
ENT_2	0.29531	0.30759							
ENT_3	0.00598	0.00599							
ENT_4	34.7153	36.3921							

TA. 8 – Dados de Girassol (Liza) utilizados para treinar a RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.0086	0.0115	0.01198	0.01381	0.01465	0.01467	0.01736	0.01885	0.02127
ENT_2	0.03169	0.04238	0.05514	0.06263	0.07135	0.08363	0.09204	0.10323	0.1179
ENT_3	0.00171	0.00229	0.00204	0.00171	0.00205	0.00204	0.00239	0.00263	0.00277
ENT_4	3.41164	4.56307	6.25347	7.42448	8.23522	9.84247	10.78468	12.14068	14.08262
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.02294	0.02458	0.02513	0.02775	0.02922	0.03164	0.0349	0.03429	0.03783
ENT_2	0.13273	0.14333	0.15458	0.1768	0.18977	0.20325	0.22172	0.23702	0.25901
ENT_3	0.00285	0.00315	0.00306	0.00347	0.00367	0.00323	0.00392	0.00432	0.00373
ENT_4	15.7782	17.0863	18.5348	21.25944	22.41816	24.16829	26.43542	28.02977	30.59492
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.03881	0.04101							
ENT_2	0.2709	0.28836							
ENT_3	0.00438	0.00484							
ENT_4	32.4055	34.5047							

TA. 9 – Dados de Girassol (Mazola) utilizados para treinar a RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00489	0.00318	0.00793	0.01018	0.0106	0.01214	0.01406	0.01699	0.01837
ENT_2	0.01276	0.02072	0.02735	0.03786	0.04634	0.04994	0.06275	0.06881	0.07852
ENT_3	5.23E-04	0.00115	0.00159	0.00148	0.00162	0.00169	0.00267	0.00209	0.0028
ENT_4	1.1876	2.10191	3.04511	4.38179	5.37375	5.77285	7.36953	8.23494	9.40253
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.02072	0.02097	0.02033	0.02159	0.02251	0.02585	0.02844	0.02993	0.03456
ENT_2	0.09065	0.09681	0.10824	0.12039	0.13467	0.13918	0.14974	0.16379	0.18199
ENT_3	0.00328	0.00334	0.00379	0.0038	0.00456	0.00448	0.00493	0.00473	0.0056
ENT_4	10.9138	11.7581	13.1816	14.51849	16.19111	16.98912	18.18175	20.04457	21.96136
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.03357	0.0346							
ENT_2	0.19527	0.19858							
ENT_3	0.00615	0.00597							
ENT_4	23.4185	24.1352							

TA. 10 – Dados de Girassol (Qualitá) utilizados para treinar a RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00463	0.00584	0.00782	0.00871	0.0109	0.01251	0.01397	0.01533	0.01824
ENT_2	0.01289	0.02147	0.02902	0.03902	0.04714	0.05722	0.06377	0.07695	0.09047
ENT_3	8.68E-04	8.49E-04	0.00116	0.00123	0.00141	0.00172	0.00178	0.00187	0.00193
ENT_4	1.29063	2.26313	3.25887	4.39747	5.40238	6.61995	7.47595	9.06226	10.65438
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.01901	0.01984	0.0225	0.02495	0.02694	0.02786	0.02843	0.03144	0.03109
ENT_2	0.09908	0.10772	0.12486	0.13794	0.14767	0.15773	0.1716	0.18138	0.19181
ENT_3	0.00203	0.00223	0.00266	0.00266	0.00281	0.00306	0.00288	0.00322	0.00322
ENT_4	11.73	12.6807	14.8692	16.46607	17.67909	18.97601	20.61155	21.82385	22.78843
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.03494	0.03621							
ENT_2	0.20632	0.21761							
ENT_3	0.00371	0.00311							
ENT_4	24.6093	25.9881							

TA. 11 – Dados de Girassol (Salada) utilizados para treinar a RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00472	0.00617	0.00873	0.01056	0.01143	0.01341	0.01532	0.017	0.01797
ENT_2	0.01491	0.02558	0.03445	0.04551	0.05413	0.066	0.07735	0.08755	0.09657
ENT_3	8.04E-04	0.00132	0.00168	0.0024	0.00255	0.00277	0.00342	0.00378	0.0042
ENT_4	1.49189	2.77697	3.90096	5.36853	6.36348	7.73975	9.31763	10.44191	11.69183
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.01844	0.02153	0.02274	0.025	0.02563	0.02753	0.02708	0.03124	0.03182
ENT_2	0.10925	0.12051	0.13268	0.14707	0.15697	0.174	0.18735	0.20127	0.2145
ENT_3	0.00447	0.00513	0.00509	0.006	0.006	0.00672	0.00646	0.00684	0.00788
ENT_4	13.0328	14.6643	16.1266	17.83014	19.1109	21.11313	22.39638	24.36017	25.78844
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.0326	0.03618							
ENT_2	0.23068	0.24801							
ENT_3	0.00824	0.00831							
ENT_4	27.7975	30.0706							

TA. 12 – Dados de Girassol (Sinhá) utilizados para treinar a RNA.

AMOSTRAS DE MILHO

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00913	0.01298	0.01681	0.0219	0.02112	0.02657	0.02872	0.03284	0.03663
ENT_2	0.02772	0.061	0.08396	0.12137	0.14378	0.17996	0.21714	0.25136	0.29057
ENT_3	0.00102	0.00119	0.00146	0.00229	0.00244	0.00298	0.0041	0.00339	0.00468
ENT_4	3.1086	6.91972	9.66736	13.71333	16.6345	20.71402	24.91072	29.22764	33.90919
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.04011	0.04443	0.0452	0.05013	0.05393	0.05538	0.06018	0.06456	0.06719
ENT_2	0.3412	0.3621	0.40225	0.45828	0.48688	0.53225	0.56788	0.61701	0.64979
ENT_3	0.00454	0.00467	0.00609	0.00595	0.00679	0.00705	0.00724	0.00811	0.00913
ENT_4	39.6429	42.7218	46.3391	52.49949	56.14376	60.66944	65.6281	71.2792	75.23254
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.07209	0.07474							
ENT_2	0.69376	0.72685							
ENT_3	0.00904	0.00902							
ENT_4	80.8824	83.9458							

TA. 13 – Dados de Milho (Bom Preço) utilizados para treinar a RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00475	0.00636	0.00843	0.01049	0.01204	0.01415	0.01507	0.01804	0.01869
ENT_2	0.01428	0.02238	0.03119	0.04139	0.04899	0.05941	0.06725	0.08284	0.091
ENT_3	8.14E-04	0.00117	0.00118	0.00107	0.00123	0.0014	0.00165	0.00173	0.00199
ENT_4	1.39517	2.37954	3.52491	4.62068	5.48727	6.83795	7.69972	9.57014	10.5903
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.02192	0.02312	0.02359	0.0248	0.02685	0.02932	0.03061	0.03178	0.03412
ENT_2	0.10356	0.11093	0.12234	0.13057	0.14464	0.15811	0.16795	0.17585	0.18429
ENT_3	0.00214	0.00224	0.00217	0.00229	0.00252	0.00282	0.00305	0.00305	0.00354
ENT_4	11.9426	13.0282	14.2732	15.24315	16.87082	18.68129	19.75439	20.79907	21.85121
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.03591	0.03614							
ENT_2	0.19395	0.21046							
ENT_3	0.00292	0.00365							
ENT_4	22.9514	24.8667							

TA. 14 – Dados de Milho (Liza) utilizados no treinamento da RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00832	0.01112	0.02107	0.02302	0.023	0.02578	0.03052	0.03514	0.04324
ENT_2	0.04455	0.05959	0.1029	0.13798	0.16019	0.18293	0.22354	0.28012	0.34955
ENT_3	0.00117	0.00157	0.00181	0.00212	0.00279	0.00285	0.0035	0.00362	0.00478
ENT_4	4.95749	6.63065	12.1951	16.03676	18.2861	21.00367	25.9292	32.27486	39.68641
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.04642	0.05018	0.05599	0.06039	0.0646	0.07571	0.07737	0.07863	0.08376
ENT_2	0.39913	0.43488	0.48066	0.53628	0.57839	0.64182	0.70221	0.76145	0.82762
ENT_3	0.00503	0.00618	0.00655	0.00654	0.00641	0.00688	0.00771	0.00971	0.00979
ENT_4	45.41358	51.23398	54.9962	61.32056	66.08859	73.21421	80.44937	85.37392	93.54297
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.09617	0.11258							
ENT_2	0.90346	1							
ENT_3	0.01019	0.00925							
ENT_4	1.02E+02	1.14E+02							

TA. 15 – Dados de Milho (Mazola) utilizados no treinamento da RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00744	0.01163	0.01467	0.01671	0.01901	0.02121	0.02326	0.02496	0.02717
ENT_2	0.03697	0.06297	0.09688	0.13323	0.16095	0.19311	0.21871	0.24766	0.27228
ENT_3	2.91E-04	0.00153	0.00184	0.00184	0.0023	0.00286	0.00332	0.0032	0.0032
ENT_4	3.68952	6.66214	10.5018	15.01413	17.96697	21.45958	24.46949	27.94903	30.41895
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.02695	0.02984	0.031	0.03546	0.03833	0.04264	0.04427	0.04681	0.04802
ENT_2	0.30604	0.34269	0.37022	0.41306	0.46092	0.50647	0.53561	0.58258	0.62269
ENT_3	0.00364	0.00429	0.00453	0.00544	0.00535	0.00581	0.00617	0.00664	0.00688
ENT_4	34.62387	38.52272	41.6977	46.28577	51.89935	56.96378	60.50523	65.22524	70.06167
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.0496	0.05465							
ENT_2	0.66107	0.69601							
ENT_3	0.00717	0.00695							
ENT_4	74.5482	78.4947							

TA. 16 – Dados de Milho (Qualitá) utilizados no treinamento da RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00619	0.00859	0.01176	0.01392	0.01543	0.01756	0.02251	0.02199	0.02381
ENT_2	0.02532	0.04104	0.05987	0.08103	0.10098	0.12226	0.14213	0.16179	0.19176
ENT_3	0.00144	0.00123	0.00182	0.00189	0.00184	0.00232	0.00275	0.00324	0.00276
ENT_4	2.65626	4.43469	6.62968	8.92146	11.40992	13.74842	16.35757	18.42637	21.74932
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.02618	0.02715	0.02929	0.0306	0.03337	0.03455	0.03626	0.03525	0.03647
ENT_2	0.21317	0.23949	0.25581	0.27346	0.30398	0.32978	0.35006	0.37136	0.38659
ENT_3	0.00308	0.00361	0.00345	0.00399	0.00371	0.00381	0.00504	0.00486	0.00481
ENT_4	23.9443	26.94638	28.7484	30.97304	34.24012	37.29788	39.71338	41.51487	43.41637
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.03868	0.03804							
ENT_2	0.40126	0.4221							
ENT_3	0.00542	0.00589							
ENT_4	45.46931	47.39484							

TA. 17 – Dados de Milho (Salada) utilizados no treinamento da RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00761	0.00906	0.01391	0.01649	0.0209	0.02372	0.02586	0.03024	0.03007
ENT_2	0.04511	0.07662	0.11512	0.15049	0.19183	0.23828	0.26544	0.33297	0.37827
ENT_3	8.71E-04	0.00136	0.00225	0.00237	0.00295	0.00334	0.00368	0.00443	0.00438
ENT_4	4.84841	8.38177	12.9457	17.11392	21.89052	26.85797	30.23808	38.22928	42.05677
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.03165	0.03423	0.03862	0.04184	0.04542	0.05117	0.05087	0.05148	0.05136
ENT_2	0.40775	0.46714	0.53572	0.60773	0.64327	0.68039	0.71727	0.74496	0.78295
ENT_3	0.00523	0.00716	0.00704	0.00741	0.00745	0.0086	0.00963	0.01183	0.01077
ENT_4	45.63332	52.02916	60.0703	67.7786	72.03563	76.3648	80.18321	82.73324	86.64031
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.05861	0.06374							
ENT_2	0.81634	0.85717							
ENT_3	0.01181	0.01197							
ENT_4	90.62816	94.73344							

TA. 18 – Dados de Milho (Sinhá) utilizados no treinamento da RNA.

AMOSTRAS DE SOJA

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.0052	0.0068	0.00884	0.01096	0.01171	0.01514	0.01699	0.01998	0.0231
ENT_2	0.01727	0.02668	0.03832	0.05302	0.06317	0.0785	0.09215	0.11348	0.12626
ENT_3	0.00126	0.00179	0.00227	0.00287	0.00351	0.00411	0.00479	0.00626	0.00666
ENT_4	1.89097	3.20567	4.76076	6.589	7.9546	10.115	11.83646	14.86687	16.38765
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.02657	0.02795	0.02992	0.03216	0.0386	0.04106	0.04454	0.04687	0.05259
ENT_2	0.14375	0.15716	0.17474	0.18975	0.21955	0.23744	0.25933	0.27673	0.30069
ENT_3	0.00765	0.0079	0.00883	0.00881	0.00999	0.0108	0.01164	0.01221	0.01253
ENT_4	18.91315	20.6412	22.8593	24.79994	28.74064	31.08182	33.90362	36.5486	39.97604
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.0539	0.05696							
ENT_2	0.3154	0.32679							
ENT_3	0.0129	0.01406							
ENT_4	41.76312	43.38957							

TA. 19 – Dados de Soja (Bom Preço) utilizados para treinar a RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00802	0.0081	0.00916	0.01044	0.00871	0.00912	0.01046	0.01123	0.01245
ENT_2	0.01612	0.01927	0.02256	0.03047	0.03367	0.04049	0.04703	0.05402	0.05983
ENT_3	9.16E-04	0.00144	0.00163	0.00217	0.00262	0.00319	0.0034	0.00373	0.0042
ENT_4	1.88065	2.21447	2.59503	3.63036	3.95699	4.74501	5.47975	6.43758	7.26732
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.01375	0.01363	0.01468	0.01597	0.01686	0.01697	0.01827	0.01926	0.02015
ENT_2	0.06966	0.07588	0.08089	0.09085	0.09685	0.1037	0.11297	0.12391	0.13201
ENT_3	0.00495	0.00514	0.00559	0.00567	0.00619	0.00632	0.00684	0.00719	0.00772
ENT_4	8.42122	9.18907	9.86321	10.99714	11.80798	12.6561	13.90637	15.26555	16.22843
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.02137	0.02274							
ENT_2	0.14069	0.15047							
ENT_3	0.00845	0.00869							
ENT_4	17.38274	18.56356							

TA. 20 – Dados de Soja (Liza) utilizados no treinamento da RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00832	0.00928	0.00974	0.0124	0.01311	0.01595	0.01789	0.018	0.02139
ENT_2	0.01958	0.03308	0.04261	0.05736	0.07075	0.08231	0.09532	0.11966	0.13425
ENT_3	0.00136	0.00187	0.0024	0.00232	0.0035	0.00329	0.00382	0.00438	0.005
ENT_4	1.91047	3.45782	4.88988	6.60575	8.26403	9.84425	11.32581	14.33779	16.19179
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.02381	0.02318	0.02522	0.02717	0.03044	0.02981	0.03017	0.03463	0.03615
ENT_2	0.14752	0.15749	0.17286	0.19018	0.21154	0.22438	0.24212	0.26017	0.27673
ENT_3	0.00596	0.00586	0.00688	0.0069	0.00769	0.0081	0.00905	0.00976	0.01004
ENT_4	18.03078	19.25417	21.2387	23.17736	25.73714	27.16014	29.69368	31.88852	33.94407
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.03736	0.03881							
ENT_2	0.29667	0.31561							
ENT_3	0.01002	0.0108							
ENT_4	36.62925	38.93989							

TA. 21 – Dados de Soja (Qualitá) utilizados no treinamento da RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00617	0.00584	0.00724	0.00942	0.00842	0.00983	0.01106	0.01351	0.01484
ENT_2	0.01537	0.02292	0.03524	0.041	0.04662	0.05607	0.06458	0.07827	0.09186
ENT_3	0.00217	0.00263	0.00392	0.00454	0.00587	0.00694	0.00753	0.00927	0.0108
ENT_4	1.80921	2.76754	4.5049	5.23364	6.07092	7.33685	8.63454	10.63247	12.29249
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.01518	0.01618	0.01753	0.01984	0.01852	0.02094	0.0217	0.02207	0.02354
ENT_2	0.09954	0.10592	0.11647	0.13146	0.14457	0.15903	0.17051	0.18437	0.20075
ENT_3	0.01093	0.0122	0.01373	0.01393	0.0163	0.01674	0.01837	0.01908	0.02015
ENT_4	13.48032	14.22519	15.7987	17.57316	19.43519	21.33629	22.90483	24.71568	26.79569
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.02619	0.02818							
ENT_2	0.21489	0.22431							
ENT_3	0.02256	0.02245							
ENT_4	28.72072	30.08551							

TA. 22 – Dados de Soja (Sadia) utilizados no treinamento da RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00568	0.00874	0.01101	0.0133	0.01576	0.01762	0.01963	0.02318	0.02545
ENT_2	0.01924	0.034	0.0484	0.0646	0.0788	0.09511	0.11223	0.13551	0.15049
ENT_3	0.00335	0.00635	0.00901	0.01263	0.01494	0.01837	0.02095	0.0253	0.02865
ENT_4	2.44197	4.72614	6.96249	9.29003	11.57261	14.03571	16.50819	19.91731	22.52159
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.02692	0.02833	0.02816	0.03138	0.03353	0.03488	0.03789	0.0378	0.03859
ENT_2	0.16599	0.17945	0.19432	0.20877	0.22865	0.25055	0.26545	0.2784	0.28972
ENT_3	0.03099	0.03316	0.03571	0.03833	0.04105	0.045	0.04624	0.0496	0.05043
ENT_4	24.67818	26.64018	28.2659	30.48997	33.27278	36.22726	38.20207	40.20241	42.03859
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.04247	0.04242							
ENT_2	0.31413	0.3353							
ENT_3	0.05399	0.05725							
ENT_4	45.2657	48.23617							

TA. 23 – Dados de Soja (Sjol) utilizados no treinamento da RNA.

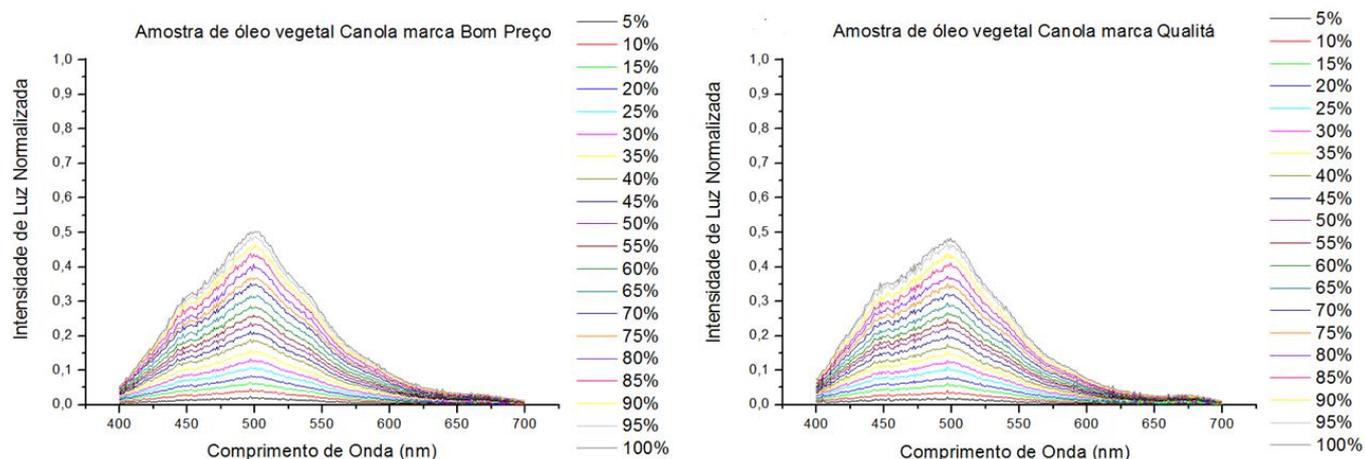
Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00597	0.0087	0.01523	0.01629	0.01985	0.02151	0.02355	0.0259	0.02857
ENT_2	0.02505	0.03652	0.06277	0.08666	0.09642	0.12102	0.13258	0.15178	0.16417
ENT_3	0.00128	0.00187	0.00273	0.00366	0.00403	0.00448	0.00557	0.00563	0.00642
ENT_4	2.85724	4.16586	7.73643	10.64211	12.14396	14.89927	16.37097	18.82476	20.83454
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.02992	0.03325	0.036	0.03905	0.04198	0.04582	0.04754	0.04902	0.05294
ENT_2	0.1829	0.1999	0.21883	0.24662	0.26167	0.28088	0.30956	0.33301	0.34784
ENT_3	0.00633	0.00699	0.00844	0.00835	0.00857	0.00933	0.00979	0.01026	0.01059
ENT_4	23.048	25.28537	27.3884	30.82754	32.8503	35.143	38.76695	41.22165	43.66077
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.05322	0.05505							
ENT_2	0.36486	0.38334							
ENT_3	0.01123	0.01238							
ENT_4	45.44382	48.12228							

TA. 24 – Dados de Soja (Soya) utilizados no treinamento da RNA.

APÊNDICE B

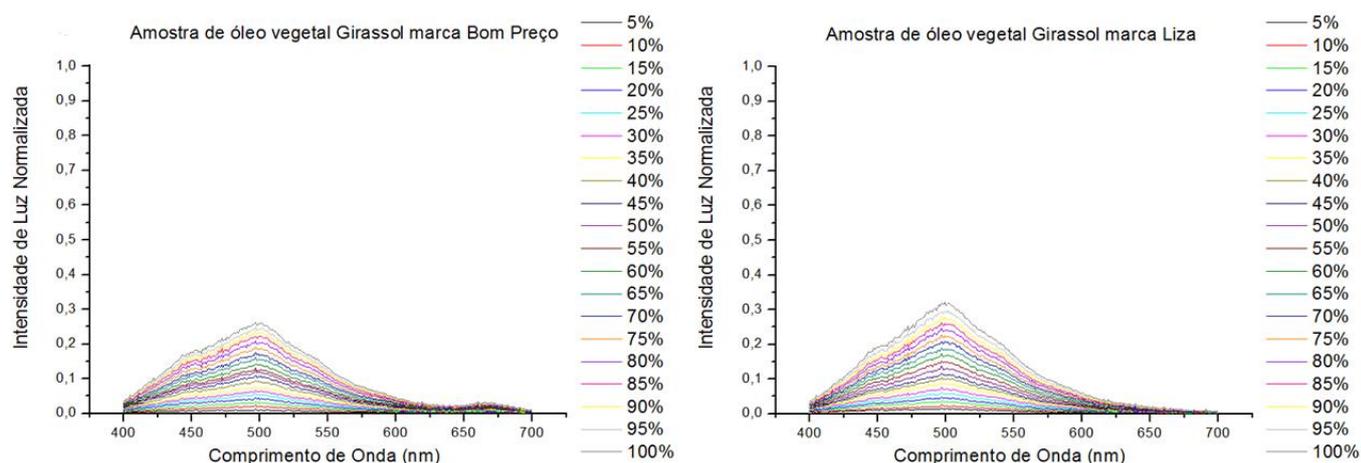
B.1 – ESPECTROS DE FLUORESCÊNCIA UTILIZADOS PARA VALIDAÇÃO DAS REDES

FLUORESCÊNCIA DAS AMOSTRAS DE CANOLA



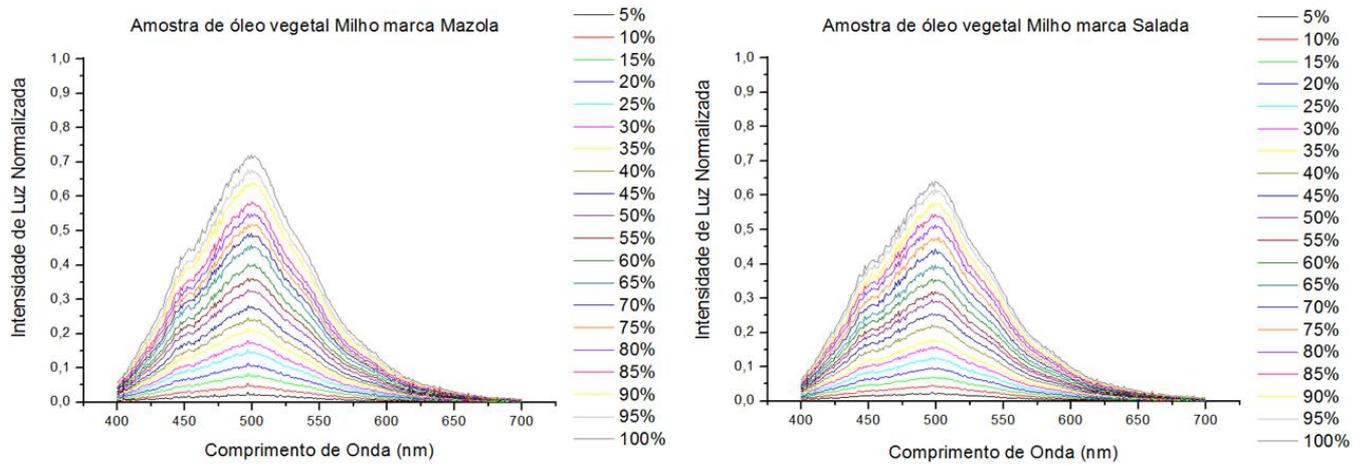
B 1 – Amostras de fluorescência de Canola/heptano usadas na validação da RNA.

FLUORESCÊNCIA DAS AMOSTRAS DE GIRASSOL



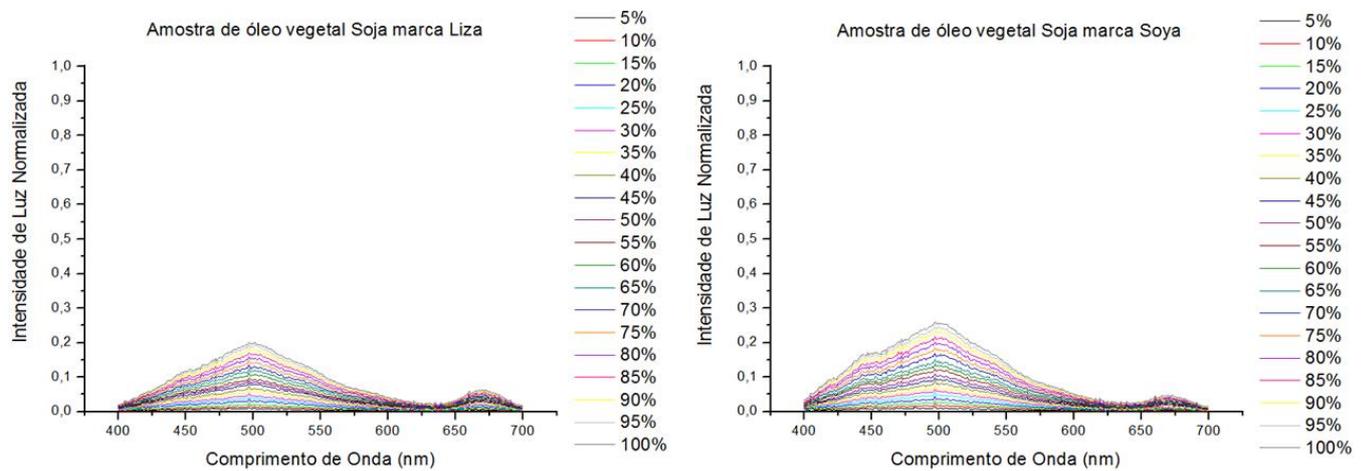
B 2 – Amostras de fluorescência de Girassol/heptano usadas na validação da RNA.

FLUORESCÊNCIA DAS AMOSTRAS DE MILHO



B 3 – Amostras de fluorescência de Milho/heptano usadas na validação da RNA.

FLUORESCÊNCIA DAS AMOTRAS DE SOJA



B 4 – Amostras de fluorescência de Soja/heptano usadas na validação da RNA.

**B.2 – DADOS DE ENTRADA PARA VALIDAÇÃO DAS REDES
AMOSTRAS DE CANOLA**

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00464	0.00972	0.01393	0.01656	0.01819	0.02297	0.02542	0.02928	0.03128
ENT_2	0.02428	0.04518	0.06453	0.08484	0.11068	0.13335	0.15786	0.19084	0.2138
ENT_3	0.00117	0.00177	0.00237	0.00314	0.00376	0.00389	0.00462	0.00555	0.00597
ENT_4	2.67215	5.26228	7.8755	10.2967	13.26393	16.00267	19.22645	23.08237	25.84195
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.03321	0.03762	0.03943	0.043	0.04734	0.04659	0.04771	0.05083	0.05207
ENT_2	0.23982	0.26071	0.2848	0.31735	0.352	0.36876	0.40799	0.43762	0.4627
ENT_3	0.00646	0.00634	0.00704	0.00767	0.00859	0.00881	0.01003	0.01099	0.01103
ENT_4	28.92875	31.70231	34.8978	38.76672	42.87077	45.33102	48.40143	52.594	55.64363
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.05489	0.05226							
ENT_2	0.48753	0.50275							
ENT_3	0.01179	0.01214							
ENT_4	58.58279	60.61371							

TB. 1 – Dados de Soja (Bom Preço) utilizados na validação da RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00737	0.0123	0.0166	0.02106	0.02434	0.0276	0.03201	0.03519	0.03758
ENT_2	0.02366	0.04073	0.06242	0.08208	0.10901	0.12885	0.15382	0.17524	0.20068
ENT_3	0.00105	0.00152	0.00195	0.00303	0.00263	0.00408	0.00387	0.00467	0.00502
ENT_4	2.4539	4.71166	7.44624	10.00032	13.11294	15.79399	18.73006	21.36815	24.77411
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.04236	0.04478	0.04853	0.05026	0.05434	0.05755	0.06191	0.06265	0.06901
ENT_2	0.22616	0.2482	0.2683	0.2952	0.32223	0.3511	0.37363	0.41006	0.43801
ENT_3	0.00604	0.00666	0.00659	0.00778	0.00819	0.0086	0.0093	0.00958	0.01008
ENT_4	28.06203	30.33631	33.15007	36.39966	40.24036	43.42755	46.5974	50.08833	53.56902
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.0724	0.07552							
ENT_2	0.4679	0.48409							
ENT_3	0.00978	0.0106							
ENT_4	57.35314	59.25032							

TB. 2 – Dados de Soja (Qualitá) utilizados na validação da RNA.

AMOSTRAS DE GIRASSOL

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00419	0.00737	0.0073	0.00983	0.01117	0.01183	0.01453	0.01585	0.01884
ENT_2	0.01389	0.02505	0.03427	0.04635	0.05814	0.06831	0.07886	0.09467	0.10879
ENT_3	0.00112	0.00115	0.00189	0.00187	0.00263	0.00322	0.00422	0.00421	0.00446
ENT_4	1.45787	2.79219	4.05433	5.60069	7.00246	8.21185	9.58074	11.66213	13.45571
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.02076	0.02234	0.02331	0.02624	0.02786	0.02904	0.03089	0.03283	0.03154
ENT_2	0.12325	0.13091	0.14297	0.16165	0.17449	0.19237	0.20908	0.22337	0.23615
ENT_3	0.00582	0.00535	0.00554	0.00725	0.00694	0.00669	0.00854	0.00838	0.00819
ENT_4	14.9494	15.93723	17.58798	19.73219	21.34632	23.48478	25.59955	27.67571	28.98207
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.03533	0.03553							
ENT_2	0.24899	0.26281							
ENT_3	0.00952	0.00904							
ENT_4	30.55434	32.55889							

TB. 3 – Dados de Girassol (Bom Preço) utilizados para validar a RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00616	1.74E-03	0.00851	0.00949	0.01165	0.01204	0.0138	0.0188	0.0159
ENT_2	0.01615	0.02669	0.03771	0.04952	0.06193	0.07575	0.09036	0.10483	0.117
ENT_3	1.77E-03	0.00191	2.39E-03	0.00245	0.00302	2.61E-03	0.00253	0.00288	0.00304
ENT_4	2.03638	2.96774	4.48702	5.89271	7.381	8.84778	10.64369	12.42009	13.74226
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.01841	0.02198	0.02376	0.02597	0.02683	0.02806	0.02935	0.03192	0.03175
ENT_2	0.13714	0.15278	0.17351	0.18991	0.20896	0.2263	0.24588	0.26142	0.27802
ENT_3	0.0037	0.0037	0.0042	0.00456	0.00446	0.00509	0.00527	0.0053	0.00573
ENT_4	15.80039	17.86641	20.20388	22.47586	24.60409	26.52351	28.75488	30.87019	32.55608
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.03309	0.03781							
ENT_2	0.29702	0.32156							
ENT_3	0.00625	0.00695							
ENT_4	35.0863	37.82925							

TB. 4 – Dados de Girassol (Liza) utilizados na validação da RNA.

AMOSTRAS DE MILHO

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00665	0.00502	0.00978	0.01301	0.01569	0.0185	0.02166	0.0234	0.02507
ENT_2	0.02939	0.05459	0.08395	0.11357	0.15123	0.17937	0.21615	0.24545	0.28156
ENT_3	0.00119	0.00103	0.00137	0.00237	0.00236	0.00274	0.0034	0.00318	0.00401
ENT_4	2.8264	5.53011	9.04121	12.50264	16.66653	19.78521	24.07259	27.57303	31.53424
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.02965	0.03172	0.03866	0.0415	0.03824	0.0453	0.04389	0.05073	0.05017
ENT_2	0.32741	0.36162	0.403	0.45921	0.49313	0.51944	0.54875	0.58429	0.63985
ENT_3	0.00413	0.00447	0.00453	0.00586	0.00624	0.00673	0.00615	0.00695	0.00709
ENT_4	36.99612	41.04842	45.08705	51.04828	55.06485	58.45733	61.77257	65.72124	72.57574
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.05458	0.05681							
ENT_2	0.67786	0.72293							
ENT_3	0.00748	0.00695							
ENT_4	76.36445	81.68956							

TB. 5 – Dados de Milho (Mazola) utilizados na validação da RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00576	0.00986	0.01266	0.01399	0.0169	0.02161	0.02338	0.02637	0.03097
ENT_2	0.02603	0.04712	0.07329	0.09855	0.12854	0.15981	0.1812	0.22227	0.25576
ENT_3	6.70E-04	0.00129	0.0013	0.00151	0.0022	0.00238	0.00245	0.00307	0.00367
ENT_4	2.81449	5.3725	8.36032	11.38034	14.69373	18.26624	20.80457	25.68586	29.78841
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.0356	0.03735	0.03888	0.0426	0.04371	0.04638	0.04837	0.05447	0.05868
ENT_2	0.29408	0.31783	0.35571	0.397	0.44415	0.47873	0.51346	0.54496	0.57802
ENT_3	0.00461	0.00446	0.00425	0.00632	0.00607	0.00669	0.00726	0.00757	0.00762
ENT_4	34.14681	37.00811	41.42074	45.5067	50.316	54.55988	58.77055	62.49866	66.27521
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.0604	0.06335							
ENT_2	0.61844	0.64081							
ENT_3	0.00832	0.00947							
ENT_4	70.90916	73.96512							

TB. 6 – Dados de Milho (Salada) utilizados na validação da RNA.

AMOSTRAS DE SOJA

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00377	0.00309	0.00752	0.00752	0.00826	0.00841	0.01096	0.01084	0.01126
ENT_2	0.01415	0.02024	0.02708	0.03647	0.045	0.0532	0.06363	0.07332	0.08422
ENT_3	0.00155	0.00228	0.00301	0.00423	0.00478	0.00635	0.00641	0.00773	0.00871
ENT_4	1.44203	2.25892	3.11567	4.52334	5.58396	6.5862	8.00324	9.22541	10.76194
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.01256	0.0124	0.01237	0.01513	0.01578	0.01743	0.01822	0.01768	0.0193
ENT_2	0.09119	0.09907	0.11267	0.12454	0.13489	0.14735	0.15873	0.17093	0.18472
ENT_3	0.00914	0.00949	0.01112	0.01103	0.01271	0.01283	0.013	0.01554	0.01479
ENT_4	11.77308	12.68654	14.31055	15.81875	17.23481	18.77219	20.36046	22.06269	23.5316
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.0201	0.02152							
ENT_2	0.19424	0.20194							
ENT_3	0.01664	0.01675							
ENT_4	24.87591	26.08022							

TB. 7 – Dados de Soja (Liza) utilizados na validação da RNA.

Diluições	5%	10%	15%	20%	25%	30%	35%	40%	45%
Entradas									
ENT_1	0.00488	0.0074	0.00507	0.00926	0.01148	0.01042	0.01313	0.01383	0.01585
ENT_2	0.01615	0.02448	0.03285	0.04307	0.05464	0.06509	0.07394	0.09056	0.09781
ENT_3	0.00136	0.00211	0.00259	0.0032	0.00331	0.00436	0.00366	0.00521	0.00616
ENT_4	1.56092	2.62028	3.70667	5.06901	6.54047	8.0013	9.00236	10.92504	12.45048
Diluições	50%	55%	60%	65%	70%	75%	80%	85%	90%
Entradas									
ENT_1	0.01544	0.01681	0.01765	0.01921	0.01973	0.02274	0.02512	0.02682	0.02972
ENT_2	0.11013	0.12385	0.13892	0.15133	0.16767	0.18579	0.20104	0.21836	0.23524
ENT_3	0.00634	0.00688	0.00783	0.00864	0.00968	0.01011	0.0104	0.01181	0.01282
ENT_4	13.84897	15.87661	17.4208	19.01983	21.50297	23.52911	25.67582	27.83544	30.18803
Diluições	95%	100%							
Entradas									
ENT_1	0.03094	0.03361							
ENT_2	0.24707	0.25981							
ENT_3	0.01232	0.01398							
ENT_4	31.72671	33.48337							

TB. 8 – Dados de Soja (Soya) utilizados na validação da RNA.