

Determinação de SO₂ atmosférico por imagens digitais.

Juliano Passaretti Filho(PG)*, Arnaldo Alves Cardoso(PQ)

Instituto de Química, Universidade Estadual Paulista, Departamento de Química Analítica, 14801-970 Araraquara - SP
juliano.passaretti@gmail.com

Palavras Chave: Imagem digital, Dióxido de enxofre, Análise multivariada.

Introdução

O dióxido de enxofre (SO₂) é um gás proveniente da queima de combustíveis fósseis. Sua emissão está associada a impactos diretos no ambiente promovendo a formação de chuva ácida e formação de sulfato no material particulado responsável pelo efeito albedo na atmosfera¹.

Neste trabalho foi desenvolvido um método químico baseado na reação de precipitação entre sulfato e cloraniliato de bário (BaCLA)². Em um tubo impinger contendo 10,00 mL de solução de peróxido de hidrogênio 0,002 molL⁻¹ e 1% Trietanolamina, foi amostrado ar atmosférico. A solução resultante foi recolhida e avolumada em 10,00 mL. Em um balão volumétrico de 5,00 mL foram transferidos 2,00 mL de solução amostrada juntamente com 2,00 mL de uma mistura em suspensão de BaCLA 500mg L⁻¹. Após a reação a solução resultante apresenta uma coloração rosa intensa proporcional à concentração de SO₂. As soluções foram colocadas em spots de acrílico digitalizadas utilizando um scanner HP Scanjet G4050. As mesmas soluções foram submetidas a medidas colorimétricas utilizando um espectrofotômetro Shimadzu UV-1800 em 540 nm. A imagem da solução resultante foi digitalizada e processada utilizando dois métodos distintos para comparação: (1) a variável Green do modelo RGB e (2) uma abordagem quimiométrica decompondo a matriz RGB em um falso espectro de intensidade composto por parâmetros de diversos modelos computacionais de falsa cor para correlacionar a concentração de SO₂ com a intensidade dessa nova matriz em modelos de regressão multivariados (PCR e PLSregress)³.

Resultados e Discussão

No método univariado SO₂ os sinais do canal Green normalizados em escala logarítmica apresentaram um Erro relativo de 13%, Coeficiente de variação de 3,3% e coeficiente de correlação de 0,9854.

Na Figura 1(a) está representado a Reação proposta para o método. b) Espectro das soluções após a reação com SO₂. c) Curva Analítica para o método para o método univariado.

Utilizando modelos de calibração multivariado associado a nova matriz de dados dos modelos de falsas cores montada a partir das variáveis R, G e B da matriz de imagem original, foram realizados

métodos calibração multivariado PCR (principal component regression) e PLS regress (partial least squares regress). Nos métodos propostos foram consideradas 25 amostras referentes ao conjunto de calibração a partir de padrões de SO₂ gerados por diluição dinâmica, 6 amostras de concentração conhecida do conjunto de validação. A comparação entre os métodos de PCR e PLS regress estão representados na tabela 1.

O modelo utilizando PLS regress apresentou melhor performance na previsão dos resultados com menor erro relativo.

Figura 1. Características do método univariado(1).

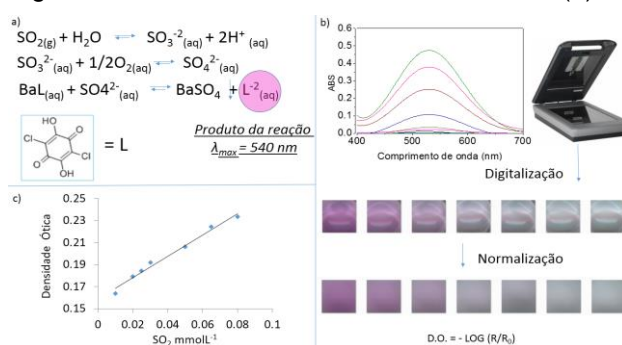


Tabela 1: Comparação entre os métodos PCR e PLS Regress (2).

Parâmetros	PCR	PLSregress
PRESS	0,0011	0,0008
d.o.f.	23	21
RMSEP	4,7826E-5	3,809E-5
Variáveis latentes	2	4
SQt	0,8534	0,8531
SQr	0,8493	0,8540
R ²	0,9951	1,001

Conclusões

O método mostrou-se de fácil aplicação e mais conveniente para determinação do dióxido de enxofre em ar. Os métodos multivariados propostos apresentaram vantagens em relação ao método univariado com menores erros relativos.

Agradecimentos

Ao CNPQ e a FAPESP pelo apoio financeiro.

¹Baird, C. *Química Ambiental* 4ª edição ed. Bookman 2011.

²F. P. Scaringelli, B. E. Saltzman, S. A. Frey *Anal Chem.* **1967**, 39(14)1709-19

³P. Santos, E. Pereira-Filho *Anal. Methods*, 5(15)3669-74.