

DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS DE QUALIDADE DE GÁS NATURAL (GN) EMPREGANDO ESPECTROSCOPIA NIR E CALIBRAÇÃO MULTIVARIADA

Marcus Vinícius Favaro dos Santos (IC), Jarbas José Rodrigues Rohwedder (PQ)

Instituto de Química- UNICAMP Caixa Postal 6154 CEP 13084-971- Campinas-SP E-Mail: jarbas@iqm.unicam.br
Palavras Chave: Gás Natural, NIR, Quimiometria

Introdução

O Gás Natural (GN) existente no mundo, dependendo da localidade em que é extraído, difere enormemente em composição e conseqüentemente em suas propriedades como Poder Calorífico e Densidade Relativa. Para saber se o GN exibe as especificações exigidas pelas normas de qualidade é importante saber sua composição bem como os fatores que influenciam na sua queima.

O objetivo deste trabalho é avaliar o emprego da Espectroscopia no Infravermelho Próximo na determinação do Índice de Wobbe, Poder Calorífico Inferior e Superior e Densidade Relativa.

Experimental

Os espectros das amostras gasosas foram obtidos em um espectrofotômetro de infravermelho próximo construído no próprio laboratório. Este instrumento foi desenvolvido empregando um filtro óptico acústico sintonizável (AOTF, Brimrose) como dispositivo de seleção de comprimento de onda, um detector de PbS (Ealing) e uma lâmpada de tungstênio como fonte de radiação. O sistema é controlado por um programa escrito em VB 3.0. A cela de medida possui caminho óptico de 540 mm e volume interno de 490 ml.

Para a construção do modelo de calibração multivariado empregando espectroscopia NIR foi preparado um conjunto de 64 amostras utilizando quatro fluxímetros (Aalborg) previamente calibrados.

Do total de amostras, 2/3 foram empregados para a construção do modelo de calibração e 1/3 como conjunto de validação. A partir das frações volumétricas obtidas das misturas gasosas por CG calculou-se, através da Norma ABNT NBR 15213:2005, os parâmetros físico-químicos como Poder Calorífico Superior, Poder Calorífico Inferior, Densidade Relativa e Índice de Wobbe. A partir destes valores foram então construídos modelos de calibração para os parâmetros físicos empregando PLS e utilizando o programa computacional Unscrambler 9.2.

Resultados e Discussão

As faixas de valores obtidas para cada parâmetro foram: Poder Calorífico Superior: 39407 – 48362 kJ/m³; Poder Calorífico Inferior: 33643 – 42116

kJ/m³; Densidade Relativa: 0,5938 – 0,7483 kg/m³; Índice de Wobbe: 51140 – 55907 kJ/m³.

Os valores dos erros bem como os coeficientes de correlação para a previsão dos modelos de calibração construídos, constam na Tabela 1.

Tabela 1. Parâmetros para o modelo de calibração multivariada

Parâmetro	Espectro	Nº PCs	RMSEP (kJ/m ³)	Erro (%)	R
PCS	Sem Pré	3	234,7	0,6	0,9957
	LB	3	198,6	0,5	0,9971
	1ª Der	3	397,9	1,01	0,9854
PCI	Sem Pré	5	287,9	0,86	0,9927
	LB	5	186,8	0,56	0,9968
	1ª Der	3	208,3	0,62	0,9964
IW	Sem Pré	3	117,1	0,23	0,9963
	LB	3	99,45	0,19	0,9975
	1ª Der	3	207,8	0,41	0,986
Parâmetro	Espectro	Nº PCs	RMSEP (kg/m ³)	Erro (%)	R
DR	Sem Pré	3	0,00407	0,68	0,9956
	LB	3	0,00344	0,58	0,9971
	1ª Der	3	0,00693	1,17	0,9851

PCS – Poder Calorífico Superior

PCI – Poder Calorífico Inferior

IW – Índice de Wobbe

DR – Densidade Relativa

LB – ajuste de linha base

1ª Der – primeira derivada

RMSEP – Raiz quadrada do erro médio de previsão

Conclusões

Observou-se que os melhores resultados são decorrentes dos espectros com ajuste de linha base. Porém, os erros diferem em no máximo 0,6% entre si e para todos os casos foram obtidos erros menores ou iguais a 1%, ou seja, a modelagem e a previsão dos dados foi muito bem sucedida através do método utilizado.

Agradecimentos

PIBIC, CTpetro/CNPq, FAPESP