

# Uma Metodologia para Classificação de Combustíveis Gasosos Usando Cromatografia Gasosa e Quimiometria

Rosimeri Barboza de Abreu(IC)<sup>1\*</sup>, Cleilson Lucena de Medeiros(IC)<sup>1</sup>, Elaine Cristina Lima do Nascimento(PQ)<sup>1</sup>, Mário César Ugulino Araújo<sup>1</sup>(PQ)

laqa@quimica.ufpb.br

<sup>1</sup>Universidade Federal da Paraíba (UFPB).

Palavras Chave: Combustíveis gasosos, cromatografia gasosa, modelos classificatórios SIMCA.

## Introdução

Alguns combustíveis gasosos se enquadram hoje como fonte importante e barata de energia, e isso é caracterizado pela eficiência, limpeza e versatilidade que eles proporcionam. Depois de tratados e processados, eles são utilizados na indústria, no comércio, em residências, em veículos, fazendo, assim, parte de inúmeras aplicações em nosso dia-a-dia. Devido as suas diversas aplicabilidades, um controle de qualidade desses gases é de fundamental importância para coibir os desvios de não conformidade e perdas de arrecadação de impostos pelos órgãos governamentais. Entretanto as normas para a especificação desses gases incluem diferentes tipos de técnicas e métodos tornando-os bastante inviáveis para os laboratórios fiscalizadores por serem laboriosos e por apresentarem um elevado custo operacional e de manutenção. As dificuldades e custos podem ser minimizados se uma metodologia para classificação de combustíveis gasosos for desenvolvida usando um único método cromatográfico e quimiometria.

## Experimental

Um único método cromatográfico foi desenvolvido de modo a detectar diferentes compostos de hidrocarbonetos. A partir deste, 60 ensaios dentre amostras e padrão de combustíveis gasosos (gás natural veicular (GNV), gás liquefeito de petróleo (GLP) e gás para recarga de isqueiros (ISQ)) foram analisados. Estes foram registrados por um cromatógrafo modelo GC-2014 da marca Shimadzu, empregando 01 válvula rotatória de seis vias (Valco); 01 coluna cromatográfica capilar (GC-GASPRO); 01 detector de ionização em chama. As condições do método foram: temperatura do injetor de 240°C; fluxo total de 144,6 ml/min; modo de injeção *split* com partição de 1:100; velocidade linear de 27.3 cm/s; pressão 59 Kpa. Para a coluna cromatográfica a temperatura foi de 90°C no modo isotérmico. No detector a temperatura foi de 250°C. O tempo total de análise foi de 20 min. Os dados obtidos por este método foram armazenados em extensão ASC II e posteriormente convertidos para extensão .xls do Excel, assim podendo estes serem importados pelo pacote quimiométrico *The Unscrambler 9.1@ CAMO S/A* para a construção dos modelos classificatórios SIMCA.

No tempo de análise eram produzidos 18.000 variáveis (tempos de retenção em milissegundos).

32ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Porém, foram usadas apenas 9.200 variáveis na faixa de 2.500 a 11.700ms, pois abaixo e acima desta região os cromatogramas não portavam informações relevantes para a construção dos modelos o tratamento quimiométrico.

## Resultados

Para selecionar os subconjuntos representativos de calibração/validação e de predição foi utilizado o algoritmo *Kennard-Stone (KS)*.

Modelos SIMCA foram construídos empregando o conjunto de calibração/validação de cada classe de combustível gasoso e a técnica de validação cruzada (*cross-validation*). A capacidade preditiva dos modelos SIMCA construídos foram então avaliados na classificação das amostras do conjunto de predição (que não fizeram parte do procedimento de calibração) bem como das amostras dos conjuntos de calibração. Observou-se que tanto as amostras dos conjuntos de calibração quanto as amostras dos conjuntos de predição foram classificadas corretamente (100% de acerto a um nível de confiança de 95%) pelos modelos SIMCA (modelo GNV, GLP e ISQ) elaborados.

## Conclusões

Uma nova metodologia para o reconhecimento de padrões e classificação de combustíveis gasosos usando a cromatografia gasosa e quimiometria foi desenvolvido. Três diferentes tipos de combustíveis gasosos foram analisados e classificados com 100% de acerto a um nível de confiança de 95% pelos modelos SIMCA (modelo GNV, GLP e ISQ) elaborados.

O fato de utilizar um único método para analisar diferentes tipos de gases minimiza os custos, quanto a colunas cromatográficas, padrões e amostras, e tempo de análise pelo fato de necessitar um único ensaio para poder detectar e diferenciar diferentes tipos de gases. Observou-se também que o tempo de análise pode ser bastante reduzido visto que só foram utilizadas aproximadamente metade das variáveis varridas pelo cromatograma e para isso só se faz necessário uma otimização do método desenvolvido.

## Agradecimentos

CAPES e CNPq