

## Análise exploratória e classificação de combustíveis gasosos usando espectrometria NIR e uma cela de fluxo labmade de aço inox

Cleilson L. de Medeiros(IC)<sup>1\*</sup>, Rosimeri B. de Abreu(IC)<sup>1</sup>, Stéfani Iury E. de Andrade(IC)<sup>1</sup>, Yebá Ngoamã M. Fagundes (IC)<sup>1</sup>, Elaine Cristina L. do Nascimento(PQ)<sup>1</sup>, Mário César U. de Araújo<sup>1</sup>(PQ)  
\*laqa@quimica.ufpb.br

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

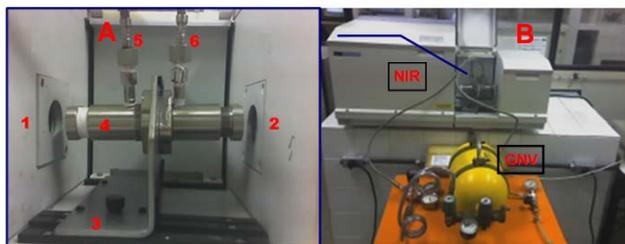
Palavras Chave: cela de fluxo, combustíveis gasosos, PCA, SIMCA, espectrometria NIR.

### Introdução

O Gás Natural Veicular (GNV), o Gás Liquefeito de Petróleo (GLP) e o gás para recarga de isqueiros (ISQ) são importantes fontes de energia para as indústrias e para a população de forma geral. Neste trabalho foi desenvolvido um método para a análise exploratória (PCA) e para a classificação (SIMCA) destes gases usando espectrometria NIR. Para obtenção de espectros NIR destes gases, em geral, encontrados comercialmente em altas pressões foi necessário o desenvolvimento de uma cela de fluxo labmade construída em aço inox.

### Experimental

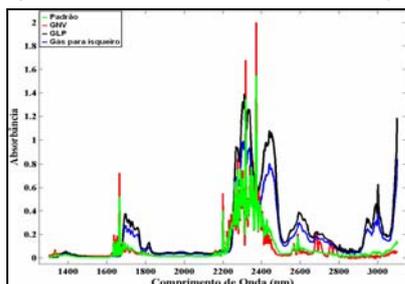
Na Fig 1A é apresentada uma fotografia da cela de fluxo desenvolvida. Ela tem janelas de vidro com espessura de 5mm, um caminho óptico de 10 cm e um diâmetro interno de 1 cm.



**Figura 1** – (A) Fotografia da Cella de fluxo labmade em aço inox. Janela do feixe de radiação NIR vindo da fonte (1) e indo para o detector (2). Suporte (3) e corpo da cela de fluxo (4). Entrada (5) e saída (6) dos gases combustíveis. (B) Fotografia da obtenção do espectro NIR de uma amostra de GNV.

Foram registrados espectros NIR de 70 amostras de mistura padrão de calibração (PD), GNV, GLP e de ISQ, na região de 1300 a 3100nm, a uma temperatura ambiente de 22°C e uma umidade relativa de 49%. O espectro do branco foi registrado enchendo a cela de fluxo com N<sub>2</sub> ultrapuro. Cada espectro registrado era uma média de 8 varreduras com resolução de 4 cm<sup>-1</sup>.

Antes do tratamento quimiométrico, os espectros foram pré-processados usando o EMSC (Fig 2).

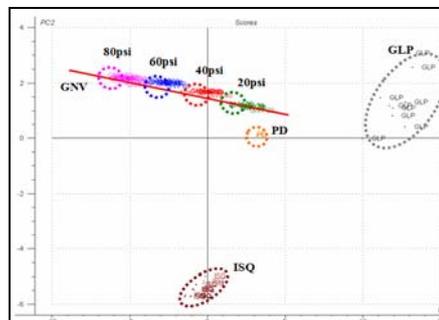


**Figura 2.** Espectros NIR dos combustíveis gasosos.

32ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

### Resultados

Usando os espectros NIR dos gases, um modelo PCA foi construído para a análise exploratória das amostras gasosas analisadas. Verifica-se no gráfico dos escores de PCA (Fig. 3) uma boa separação de 4 classes de combustíveis gasosos: de GNV (em diferentes pressões), PD; GLP e ISQ. Isto ocorre porque estas classes apresentam teores diferentes dos componentes majoritários (metano, etano, propano e/ou butano).



**Fig. 3** Gráfico dos escores de PCA dos gases analisados.

Antes da construção dos modelos SIMCA de classificação, o algoritmo Kennard-Stone (KS) foi empregado para selecionar, dentro das amostras analisadas, os conjuntos de calibração/validação e de predição. Em seguida, o conjunto de calibração/validação foi usado para a construção e validação dos modelos SIMCA de cada classe. Para isso, foi utilizada a técnica de validação cruzada. Os modelos SIMCA foram, então, aplicados na classificação das amostras do conjunto de predição (que não fizeram parte da calibração/validação), bem como em todas as amostras de calibração. Todas as amostras analisadas foram classificadas corretamente (100% de acerto a um nível de confiança de 95%).

### Conclusões

A cela de fluxo labmade desenvolvida apresentou um desempenho satisfatório para obtenção com segurança dos espectros NIR de amostras gasosas quando estas estão em alta e baixa pressão.

Usando PCA, verificou-se a existência de uma boa discriminação dos 4 tipos de amostras gasosas analisadas por espectrometria NIR. Um ótimo resultado foi obtido quando os modelos SIMCA foram aplicados na classificação de todas as amostras gasosas analisadas.

### Agradecimentos

À CAPES e CNPq