

Análise por triagem de amostras de GNV e GLP usando espectrometria NIR e quimiometria

Hebertty Vieira Dantas(PG)^{1*}, Mayara Ferreira Barbosa(IC)¹, Elaine Cristina Lima do Nascimento(PQ)², Pablo Nogueira Teles Moreira(PG)¹ e Mário César Ugulino de Araújo(PQ)¹

*heberttyvd@gmail.com

¹Universidade Federal da Paraíba (UFPB);

²Universidade Federal Rural de Pernambuco – Unidade Acadêmica de Serra Talhada (UFRPE – UAST)

Palavras Chave: Triagem, screening, espectrometria NIR, GNV, GLP, quimiometria

Introdução

A busca por novas fontes de energia e a preocupação com problemas ambientais provocaram um aumento no uso de combustíveis gasosos como o gás natural veicular (GNV) e gás liquefeito de petróleo (GLP). Diante dessa realidade, cresce a necessidade e a demanda pelo monitoramento da qualidade e fiscalização desse tipo de combustível. Esse trabalho propõe a utilização da análise por triagem (*screening*) da qualidade dos combustíveis gasosos¹⁻³ para verificação de adulterações ou não-conformidades, por espectrometria de absorção no infravermelho próximo (NIR).

Metodologia Experimental

A Figura 1 mostra um diagrama do sistema de análise utilizado.

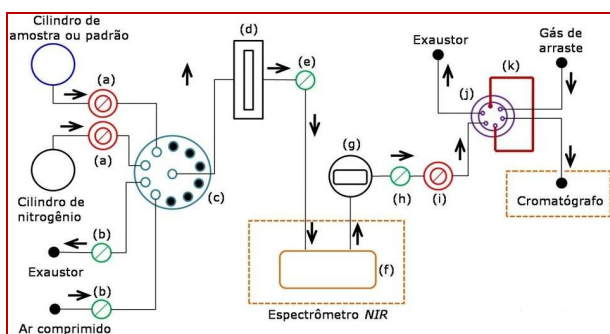


Figura 1. Diagrama do sistema de análise. (a) reguladores de pressão; (b) válvulas de controle; (c) confluência dos gases; (d) fluxômetro; (e) registro de entrada; (f) célula de medida; (g) manômetro digital; (h) e (i) registro e regulador de pressão de saída para o cromatógrafo; (j) válvula de injeção automática; (k) Loop de amostragem.

Usando esse sistema de análise gasosa, 106 amostras de GNV e GLP (amostras adulteradas, não-adulteradas e padrões certificados), foram analisadas por NIR e CG de forma seqüencial. Os dados espectrais foram divididos em conjuntos de treinamento, teste e predição, utilizando o algoritmo Kennard-Stone (KS).

A célula de medida foi construída em aço inox de modo a suportar alta pressão gasosa. Ela possui um caminho óptico de 10,0 cm e 1,0 cm de diâmetro. Nas medidas dos espectros NIR foi usada uma pressão constante de 4,0 bar, uma varredura de 16 scans e resolução de 2,0 cm⁻¹.

Resultados e Discussão

Métodos de reconhecimento de padrão, HCA e PCA, foram inicialmente aplicados aos espectros NIR centrados na média, em uma região de trabalho selecionada (9200 a 5200 cm⁻¹), de modo a se fazer uma análise exploratória. Em seguida, métodos de classificação, SPA-LDA, SIMCA e SPA-SIMCA⁴⁻⁵, foram elaborados e validados para a triagem de amostras adulteradas e não-adulteradas, e os resultados obtidos são apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Erros de classificação dos modelos.

*Modelo	S-L	SI	S-SI	SI	S-SI	SI	S-SI	S	S-SI
		NC 99%	NC 95%	NC 95%	NC 90%	NC 75%			
GNV	4	4	5	3	2	1	2	2	2
	(7,4)	(7,4)	(9,3)	(5,6)	(3,7)	(1,9)	(3,7)	(3,7)	(3,7)
GLP	4	2	0	2	0	2	1	0	1
	(7,4)	(3,7)	(0,0)	(3,7)	(0,0)	(3,7)	(1,9)	(0,0)	(1,9)

*S-L: SPA-LDA; SI: SIMCA; S-SI: SPA-SIMCA; NC: Nível de confiança; (): erros percentuais.

De acordo com os resultados apresentados na Tabela 1, o modelo SPA-SIMCA (a um nível de 95%) foi o que produziu os melhores resultados.

Conclusões

Os resultados demonstraram que a metodologia desenvolvida, usando SPA-SIMCA, é uma alternativa promissora, eficaz e robusta para realizar análises preliminares (triagem), auxiliando o controle de qualidade do GNV e GLP e minimizando a necessidade do uso de métodos cromatográficos, geralmente usados para essa finalidade.

O emprego do SPA junto com a modelagem SIMCA permitiu uma redução significativa do número de variáveis para menos de 1%, quando comparado ao número de variáveis da região espectral de trabalho. Além disso, as variáveis selecionadas pelo SPA podem ajudar nas escolhas de filtros ou LEDs, a serem usados na construção de fotômetros NIR de baixo custo para triagem de GNV e GLP.

Agradecimentos

LAQA, UFPB, CAPES e CNPq

¹ Pasquini, C. e Silva, M. D. H. *J. Braz. Chem. Soc.* **1999**, 10, 85.

² Werle, P., et al. *Optics and Lasers in Engineering.* **2002**, 37, 101.

³ Zhou, J. e Brown, C. W. *Soc. Appl. Spect.* **2001**, 55, 44.

⁴ Araújo, M. C. U., et al. *Chem. Intell. Lab. Syst.* **2001**, 57, 63.

⁵ Moreira, E. D. T. et al. *Talanta.* **2009**, 79, 1260.