

## Determinação da Densidade de Petróleos utilizando ATR-FTIR e modelos de regressão multivariada

Paulo R. Filgueiras<sup>1\*</sup> (PG), Alexandre R. Loureiro<sup>1</sup> (IC), Cristina M. S.Sad<sup>1</sup> (PG), Eustáquio V. R. Castro<sup>1</sup> (PQ). \*pauloiuna@hotmail.com

<sup>1</sup> Universidade Federal do Espírito Santo, Departamento de Química, Laboratório de Pesquisa e Desenvolvimento de Metodologias para a Análises de Petróleos, Av. Fernando Ferrari s/n, Goiabeiras, Vitória-ES, CEP:29060-900.

Palavras Chave: Densidade, Calibração Multivariada, FTIR.

### Introdução

O petróleo é uma mistura complexa na qual existem quantidades variáveis de todas as classes de compostos<sup>1</sup>. A partir de sua densidade é possível estimar os tipos de derivados que terão maiores possibilidades de serem produzidos na refinaria<sup>2</sup>. Neste sentido, análise de Infravermelho com refletância total atenuada (ATR-FTIR), desperta interesse sobre a quantificação de parâmetros físico-químicos em petróleos, porém os resultados obtidos são extensos bancos de dados com inúmeras informações. Dessa forma, faz-se necessário a utilização de métodos de calibração multivariada como os Mínimos Quadrados Parciais (PLS, do inglês – Partial Least Squares) e PLS por intervalos (iPLS), no qual divide os espectros em intervalos iguais e aplica a regressão PLS em cada um dos intervalos.

Encontra-se na literatura vários trabalhos que determinam a quantificação de parâmetros físico-químicos de diesel, biodiesel e misturas diesel/biodiesel, através da espectroscopia no infravermelho associada a técnicas de calibração multivariada<sup>3</sup>. Este trabalho tem por objetivo determinar a densidade de petróleos *in natura* utilizando ATR-FTIR e modelos de calibração multivariada com seleção de variáveis.

### Resultados e Discussão

O estudo foi realizado no LabPetro – UFES no período de agosto a novembro de 2010. Foram Selecionadas 68 amostras de petróleos crus com densidades entre 0,910 a 0,960 g/cm<sup>3</sup> segundo o norma ASTM D 5002. As amostras foram divididas em dois conjuntos: 48 para calibração do modelo e 20 para previsão. Foram tomados espectros MIR e os dados importados para o ambiente MATLAB, onde se realizou a correção da linha de base e aplicou-se modelos PLS e iPLS com 20, 25, 30, 35, 40, 45 e 50 intervalos.

Os melhores parâmetros de avaliação dos modelos de calibração multivariada são a raiz quadrada dos erros médios do conjunto de previsão (RMSEP) e validação cruzada (RMSECV), nesta ordem de prioridade, porém um bom modelo deve

apresentar erros baixos e similares. O modelo com espectro completo (PLS) apresentou RMSECV de 0,25% e RMSEP de 0,24%. A utilização da seleção de variáveis pelo método iPLS exibiu melhores resultados (Figura 1). O modelo que obteve o menor RMSEP, foi o iPLS com 20 intervalos, entretanto este possui alto valor de RMSECV, apresentando grande diferença entre os dois parâmetros. O modelo iPLS com 30 intervalos apresentou melhores resultados com erros em torno de 0,20% para ambos os parâmetros analisados.

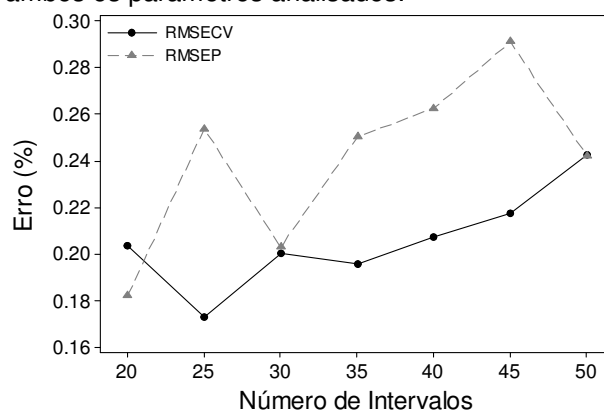


Figura 1. Resultados dos modelos de iPLS para a densidade a 20<sup>o</sup> C.

### Conclusões

Os resultados indicam que a técnica ATR-FTIR associada a calibração multivariada com seleção de variáveis iPLS apresenta-se como alternativa para a determinação da densidade de petróleos e suas misturas. O modelo iPLS com 30 intervalos apresentou resultados satisfatórios na determinação da densidade dos petróleos, com erros de calibração e previsão em torno de 0,20%.

### Agradecimentos

LABPETRO (UFES), PETROBRAS E CENPES.

<sup>1</sup> GUIMARÃES, R. C. L., Caracterização de petróleo e interpretação de resultados, PETROBRAS/CENPES/PDP/AP, Rio de Janeiro, RJ, **2004**.

<sup>2</sup> RIAZI, M. S. Characterization and properties of petroleum fractions, American Society for Testing and Materials, **2005**.

<sup>3</sup> PEREIRA, A.F.C.; PONTES, M. J. C.; NETO, F. F. G; SANTOS, S. R. B.; GALVÃO, R. K. H.; ARAÚJO, M. C. U.. Food Research International. 41 . 341–348. **2008**.