

# Determinação da Viscosidade Cinemática de Petróleos *in natura* utilizando Calibração Multivariada e Espectroscopia no Infravermelho

Alexandre R. Loureiro<sup>1\*</sup> (IC), Paulo R. Filgueiras<sup>1</sup> (PG), Cristina M. S.Sad<sup>1</sup> (PG), Eustáquio V. R. Castro<sup>1</sup> (PQ). \*alexandre1000@r7.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: Viscosidade Cinemática, Calibração Multivariada, FTIR.

## Introdução

A Viscosidade Cinemática é um parâmetro de grande importância no dimensionamento dos equipamentos utilizados na exploração do petróleo, pois além de controlar a escolha de que intervalo do reservatório deve ser completado e em quais poços, permite uma avaliação sobre a viabilidade econômica das áreas de produção<sup>1</sup>. Além disso, muitas considerações importantes ligadas à qualidade do petróleo podem ser inferidas a partir da determinação da sua viscosidade<sup>2</sup>. Neste sentido, modelos de regressão multivariada, exemplo, o Método dos Mínimos Quadrados Parciais (PLS, do inglês – Partial Least Squares) com seleção de variáveis, são utilizados para prever valores de viscosidade de amostras de petróleos e suas misturas ou *blends*. Este modelo é baseado na relação entre duas matrizes de dados, uma matriz X (absorbância a diversas frequências) e uma matriz de dados Y (valores de viscosidade). Por fim, utiliza-se dessa relação, que é a base da Calibração Multivariada, para prever valores de viscosidade, de novas amostras ou *blends*, a partir dos espectros no infravermelho.<sup>3</sup>

O PLS por intervalo (iPLS) seleciona intervalos espectrais e aplica o modelo PLS em cada um dos intervalos.

Este trabalho tem por objetivo determinar a Viscosidade Cinemática de petróleos bruto utilizando ATR-FTIR e modelos de regressão multivariada com seleção de variáveis.

## Resultados e Discussão

No período de agosto a novembro de 2010, um conjunto de 68 amostras de petróleo com viscosidade cinemática variando de 93,6 a 874 mm<sup>2</sup>/s foram analisadas no LabPetro – UFES por ATR-FTIR e aos dados coletados aplicou-se modelos de regressão PLS e iPLS.

Os modelos iPLS foram gerados com 20, 25, 30, 35, 40, 45 e 50 intervalos. O melhor parâmetro de avaliação dos modelos é analisar raiz quadrada dos erros médios, RMSECV para validação cruzada e RMSEP para previsão. Um bom modelo deve apresentar erro similar e baixo. Tabela 1, o modelo que apresentou o menor RMSEP foi iPLS\_20, mas este possui alto valor de RMSECV, tendo uma 34ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

grande diferença entre os dois parâmetros. O melhor resultado podem ser dados aos modelos iPLS\_30 e iPLS\_40.

**Tabela 1.** Resultados dos modelos de regressão PLS e iPLS para a viscosidade cinemática a 40° C.

Modelo	Calibração		Previsão	
	r-cv	RMSECV	r-p	RMSEP
PLS	0,941	3,56	0.987	2,10
iPLS_20	0,964	2,78	0.979	1,98
iPLS_25	0,973	2,38	0.979	3,01
iPLS_30	0,971	2,45	0.979	2,53
iPLS_35	0,971	2,45	0.959	2,63
iPLS_40	0,970	2,49	0,968	2,52
iPLS_45	0,967	2,64	0,957	3,53
iPLS_50	0,959	2,90	0,961	2,84

\*r-cv – coeficiente de correlação dos dados de validação.

\*\*r-p – coeficiente de correlação dos dados de previsão.

## Conclusões

Os resultados obtidos empregando a técnicas de regressão se mostraram promissores no desenvolvimento de metodologias mais simples, rápidas e não destrutivas para a determinação da viscosidade dos óleos.

O iPLS com 40 intervalos obteve os resultados mais satisfatórios com erros menores de calibração de 2,49% e previsão de 2,52%. Dessa forma, os resultados indicam que o emprego de ATR-FTIR, aliada a Calibração Multivariada, é uma excelente alternativa para a determinação direta da viscosidade em petróleos bruto e também suas misturas.

## Agradecimentos

LABPETRO (UFES), PETROBRAS E CENPES

<sup>1</sup>MACHADO, J. C. V. *Reologia e escoamento de fluidos – Ênfase na indústria do petróleo*. Editora Interciência. Rio de Janeiro, RJ. 2002.

<sup>2</sup>THOMAS, J. E. *Fundamentos da Engenharia do petróleo*. Editora Interciência. 2ª Ed. Rio de Janeiro, RJ. 2001.

<sup>3</sup>Aguiar, J. G.; Borin, A.; POPPI, R. J. Determination of viscosity and solids in pressure-sensitive adhesives by FTIR-ATR and multivariate calibration. *J. Braz. Chem. Soc.* [online]. 2010, vol.21, n.3, pp. 436-440.