

João Paulo Piva e Jarbas José Rodrigues Rohwedder
 Departamento de Química Analítica – Instituto de Química - UNICAMP
 Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica – PIBIC/CNPq
Gás Natural – Espectroscopia NIR - Quimiometria

Introdução

A determinação dos teores de hidrocarbonetos gasosos, de dióxido de carbono e de água são importantes para definir a qualidade do Gás Natural. Particularmente, o teor de água e CO₂ deve ser constantemente avaliado, uma vez que estas espécies causam corrosões nos dutos e nas instalações industriais. Métodos rápidos e robustos são requisitos necessários para a instrumentação analítica do processo. Assim, o objetivo deste trabalho é avaliar o uso da espectroscopia NIR associada à quimiometria como uma alternativa rápida, versátil e robusta na determinação de parâmetros de qualidade do GN.

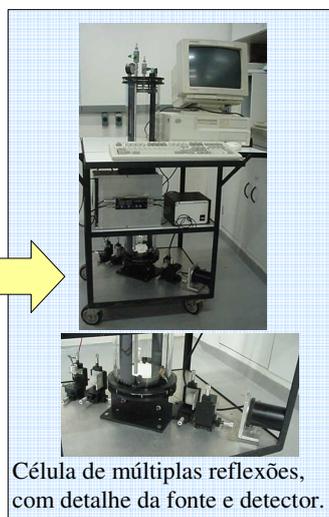
Metodologia

Tabela 1 – Faixas de concentração para as diferentes espécies no conjunto de calibração.

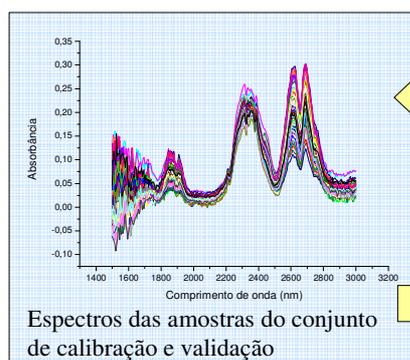
	Metano (%v/v)	Etano (%v/v)	Propano (%v/v)
Mínimo	65,8	1,8	0,8
Máximo	92	23	8,8
	Butano (%v/v)	CO ₂ (%v/v)	Água (g/m ³)
Mínimo	0,3	0,8	2,5
Máximo	5,2	7,7	8,5



Cilindros com gases utilizados na mistura e sistema para injeção de vapor de água.



Célula de múltiplas reflexões, com detalhe da fonte e detector.



Tratamento Quimiométrico

Resultados

Tabela 2 – Parâmetros obtidos por PLS para o modelo de calibração construído, após ajuste de linha base dos espectros.

METANO (7 PCs) - 96%				
	Slope	Offset	Correlation	RMSEC/P
Calibração	0,9825	1,372	0,9912	0,8327
Validação	0,9423	4,592	0,9790	1,289
ETANO (7 PCs) - 93%				
	Slope	Offset	Correlation	RMSEC/P
Calibração	0,9795	0,2315	0,9897	0,8613
Validação	0,9128	0,9582	0,9646	1,590
PROPANO (14 PCs) - 70%				
	Slope	Offset	Correlation	RMSEC/P
Calibração	0,9988	0,0050	0,9994	0,0730
Validação	0,6417	1,442	0,8192	1,197
CO ₂ (6 PCs) - 94%				
	Slope	Offset	Correlation	RMSEC/P
Calibração	0,9654	0,1374	0,9825	0,3927
Validação	0,9211	0,3148	0,9642	0,5601
ÁGUA (4 PCs) - 60%				
	Slope	Offset	Correlation	RMSEC/P
Calibração	0,6732	1,797	0,8205	1,143
Validação	0,6075	2,136	0,7371	1,363

O baixo valor de correlação observado para o teor de água e a falta de correlação para o teor butano indicam uma sobreposição das bandas deste dois compostos. Além disso, o baixo valor da razão sinal ruído deve também ter contribuído para este comportamento

Conclusão

Os resultados iniciais revelam a possibilidade do uso da espectroscopia NIR associada à quimiometria para determinação de hidrocarbonetos gasosos, de dióxido de carbono e de água na composição do GN. Os melhores resultados foram obtidos para o conjunto de espectros cuja linha base foi corrigida.