

Marcus Vinícius Favaro dos Santos, Jarbas José Rodrigues Rohwedder\*

Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Química, CP 6154, 13084-971, Campinas-SP, Brasil.

\*e-mail: jarbas@iqm.unicamp.br

Gás Natural – Espectroscopia NIR - Quimiometria

## OBJETIVOS

Avaliar o emprego da Espectroscopia no Infravermelho Próximo na determinação de alguns dos principais parâmetros físico-químicos de qualidade de GN tais como poderes caloríficos superior e inferior, densidade relativa e o índice de Wobbe em misturas gasosas combustíveis artificiais.

## INTRODUÇÃO

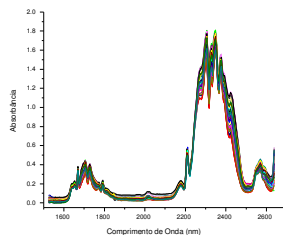
O Gás Natural (GN) existente no mundo, dependendo da localidade em que é extraído, difere enormemente em composição e conseqüentemente em suas propriedades como Poder Calorífico e Densidade Relativa. Para saber se o GN exibe as especificações exigidas pelas normas de qualidade é importante saber sua composição bem como os fatores que influenciam na sua queima.

## EXPERIMENTAL



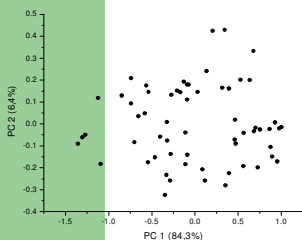
Fluxímetros e misturadores

Espectrofotômetro NIR



Das 61 amostras do espectro, 33 foram usadas para calibração e 25 para validação

Tratamento Quimiométrico



Através da análise por PCA observou-se que nenhuma amostra era anômala ao conjunto. (Figura 2)

Valores de fração volumétrica em porcentagem de cada componente nas 61 amostras:  
 Metano(72,7-89,5) Etano(3,0-13,3) Propano(0,56-8,70)  
 Butano(0,40-3,30) Gás Carbônico(0,93-6,15) Nitrogênio(0,77-6,00).

Faixas dos parâmetros obtidos para o conjunto de amostras:  
 PCS: 37053 – 45770 kJ/m<sup>3</sup>; PCI: 31120 – 38980 kJ/m<sup>3</sup>;  
 DR: 0,6402 – 0,7570 kg/m<sup>3</sup>; IW: 45111 – 53632 kJ/m<sup>3</sup>.  
 Valores encontrados conforme a Norma ABNT NBR 15213:2005

## RESULTADOS E DISCUSSÕES

**Tabela 1.** Valores de RMSEP, erro relativo e coeficientes de correlação para as amostras do conjunto de validação

Parâmetro	Espectro	n.º PCs	RMSEP (kJ/m <sup>3</sup> )	Erro (%)	R
PCS	Sem Pré	6	604,7	1,63	0,9486
	LB	6	496,5	1,34	0,9690
	1ª Der	7	560,9	1,51	0,9564
PCI	Sem Pré	6	322,7	1,04	0,9810
	LB	5	379,4	1,22	0,9752
	1ª Der	6	300,2	0,96	0,9840
IW	Sem Pré	5	435,5	0,97	0,9743
	LB	5	433,3	0,96	0,9706
	1ª Der	7	463,9	1,03	0,9675
DR	Sem Pré	5	0,01086	1,70	0,9434
	LB	5	0,01044	1,63	0,9503
	1ª Der	6	0,007675	1,20	0,9690

PCS – Poder Calorífico Superior

DR – Densidade Relativa

PCI – Poder Calorífico Inferior

LB – ajuste de linha base

IW – Índice de Wobbe

1ª Der – ajuste de 1ª derivada

RMSEP – Raiz quadrada do erro médio de previsão

## CONCLUSÕES

Observou-se que os erros para qualquer tipo de pré-tratamento dos dados não diferenciavam significativamente entre si e foram em média 1,3% indicando que o resultado final não é dependente do tipo de pré-tratamento. De maneira geral, os coeficientes de correlação foram superiores a 0,9434 indicando que os modelos multivariados apresentam boa capacidade de previsão para os parâmetros físico-químicos de qualidade do GN.

## AGRADECIMENTOS