



**XXXIII SIC** SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2021
<b>Local</b>	Virtual
<b>Título</b>	Desenvolvimento de predição de destilação baseados em cromatografia a gás e calibração multivariada
<b>Autor</b>	BRUNA CUNHA DIAS
<b>Orientador</b>	ADRIANO DE ARAÚJO GOMES

## **Desenvolvimento de predição de destilação baseados em cromatografia a gás e calibração multivariada**

Bruna Cunha Dias <sup>IC</sup>, Adriano de Araújo Gomes<sup>PQ</sup>

Nos últimos tempos, um novo modelo de indústria está sendo discutido em todo o mundo sob o tópico de Indústria 4.0. Com um mercado cada vez mais competitivo, as indústrias estão cada vez mais na busca por alta produtividade, melhor qualidade, customização, redução de custos, maior segurança, entre outros. A indústria química nas últimas décadas também está nesta busca para atender às exigências do mercado atual e aplicações de quimiometria vêm cada vez mais sendo empregadas. Com o objetivo de implementar novas metodologias analíticas para predição de parâmetros de destilação baseados em cromatografia a gás e calibração multivariada, foi realizada parceria com uma indústria petroquímica, na qual foram disponibilizados os dados para a aplicação deste trabalho, a fim de otimizar análises, tempo e exposição de analistas de laboratórios, redução de geração de resíduos e gasto energético. Realizou-se um estudo em banco de dados com resultados de análises de produto C7C8 aromáticos, na qual foram selecionados resultados de cromatografia e destilação, a fim de identificar correlação entre as duas técnicas, e deste modo, construir um modelo preditivo de dois pontos de destilação: o ponto inicial e o ponto seco (final). A metodologia utilizada foi a regressão multivariada (Calibração) por PLS (Regressão pelo Método dos Quadrados Mínimos Parciais), utilizando-se o software MATLAB®. As amostras foram pré-processadas por auto escalamento e selecionou-se o conjunto de calibração e predição por algoritmo Kennard-Stone, adaptado para calibração (SPXY). As variáveis escolhidas foram determinadas pelos coeficientes de regressão. Os modelos obtidos foram avaliados com bases nas principais figuras de mérito de acurácia, exatidão e precisão, assim como confrontados com as normas vigentes da ANP. Seus resultados mostraram-se satisfatórios, para então aplicação em laboratório de controle de qualidade.