

NOVAS TECNOLOGIAS PARA ANÁLISE E CARACTERIZAÇÃO DE LIGANTES BETUMINOSOS: ALGUNS EXEMPLOS RELACIONADOS COM CONTROLO DE PRODUÇÃO E DESENVOLVIMENTO DE NOVOS PRODUTOS.

Jorge Ribeiro¹ (Mestre em Química); Catarina Varanda² (Mestre em Engenharia Química).

Tema: Ambiente e Sustentabilidade

Palavras-chave: Betume; Penetração; Amolecimento; Quimiometria; Espectroscopia

RESUMO EXECUTIVO

O controlo processual no fabrico de betumes base (ligantes betuminosos) é um factor fundamental na eficiência e reprodutibilidade da produção, com impactos não só nos consumos energéticos e emissões mas também na adequação do produto final a cada uma das suas utilizações como material técnico.

O objetivo deste trabalho é utilizar a espectroscopia de RMN ¹H (Ressonância Magnética Nuclear protónica) para prever características de ligantes betuminosos importantes para o seu controlo de fabrico e avaliação de desempenho (Penetração e Temperatura de Amolecimento), com base em modelos construídos a partir de redes neuronais artificiais. A determinação de espectros de RMN ¹H é muito mais célere do que os ensaios de Penetração e Temperatura de Amolecimento clássicos, permitindo a obtenção de resultados com elevada rapidez e, assim, disponibilizar dados para melhorar o controlo processual, garantindo maior eficiência e, conseqüentemente, menores consumos energéticos e emissão de poluentes.

PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL E PROCESSAMENTO DE DADOS

Os valores de Penetração e a Temperatura de Amolecimento das amostras foram determinados através dos métodos EN 1426 e EN 1427, respectivamente. Os espectros de RMN ¹H foram adquiridos com um espectrómetro Bruker Avance 300, a operar à temperatura ambiente e com uma frequência de 300.13MHz (Universidade de Aveiro). As amostras de betume foram preparadas diluindo 0.20g da amostra em 1mL de clorofórmio deuterado (CDCl₃), tendo sido usado tetrametilsilano [Si(CH₃)₄] como padrão interno.

Para o desenvolvimento do modelo os dados foram divididos em 3 grupos: treino, validação e teste na razão de 60%, 20% e 20%, respetivamente. O grupo de treino foi utilizado para construir o modelo e determinar os seus parâmetros ótimos. O grupo de teste foi usado para determinar a dimensão ótima do modelo, evitando efeitos de *overfitting* ou *underfitting*. O grupo de validação foi utilizado para avaliar a capacidade preditiva do modelo com um conjunto de dados independentes. As redes usadas foram

do tipo progressivas (*feedforward*) com 3 camadas e foram testadas usando 3 nodos na camada interior.

RESULTADOS OBTIDOS

A área dos espectros foi dividida em segmentos contantes (bins) de 0.02ppm. Os resultados obtidos encontram-se evidenciados na Fig. 1.

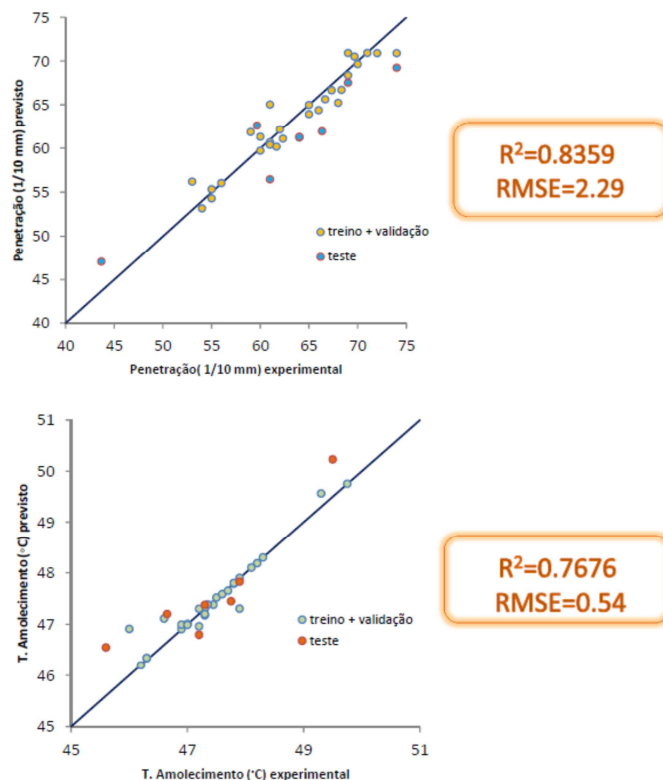


Fig. 1. Correlação entre os dados experimentais e os dados modelados (Redes Neurais) para a Penetração e Temperatura de Amolecimento em betume de pavimentação (*grade* ~ 50-70).

CONCLUSÃO

De acordo com os resultados apresentados, é possível concluir que a espectroscopia de RMN ^1H combinada com Redes Neurais Artificiais pode ser uma ferramenta de elevado valor para monitorizar a Penetração e Temperatura de Amolecimento de ligantes betuminosos, permitindo reduzir o tempo de análise comparativamente aos métodos *standard*. É possível, assim, ter um controlo mais eficiente do processo produtivo e conseguir um grau de otimização mais elevado com as consequências inerentes na redução dos consumos energéticos e emissões.

¹jorge.ribeiro@galpenergia.com, GalpEnergia, Refinaria de Matosinho, Leça da Palmeira;

²catarina.varanda@galpenergia.com, Galp Energia, Refinaria de Matosinhos, Leça da Palmeira