

Determinação de Adulterantes em Gasolinas por FT-IR e Calibração Multivariada

Leonardo Sena Gomes Teixeira¹ (PQ)*, Fábio Santos de Oliveira² (PQ), Hilda Costa dos Santos³ (PQ), Paulo W. R. Cordeiro¹ (IC). *E-mail:leonardoteixeira@unifacs.br

¹UNIFACS, Departamento de Engenharia e Arquitetura, Salvador-BA, ²Instituto de Química - UFBA, Salvador-BA,

³Serviço Nacional de Aprendizagem Industrial – Centro de Tecnologia Industrial Pedro Ribeiro, Lauro de Freitas-BA

Palavras Chave: adulteração da gasolina, FT-IR, calibração multivariada.

Introdução

A adulteração das gasolinas pela adição de solventes é uma prática ilegal que ocorre com frequência relativamente elevada. A adição ilegal de solventes acarreta em perdas de arrecadação por sonegação fiscal, além de lesionar os consumidores.

No presente trabalho foi proposto o emprego da espectroscopia no infravermelho associada à calibração multivariada para identificação e determinação de solventes comumente empregados como adulterantes em gasolinas.

Resultados e Discussão

Um espectrômetro IROX 2000 (Grabner Instruments) foi empregado para aquisição dos espectros na região de 3700-650 cm^{-1} de amostras de gasolinas adulteradas com teores entre 3% e 50% de cada contaminante, constituído um conjunto de 30 amostras para cada tipo de adulterante avaliado.

A partir desses espectros FT-IR, foi construído um modelo de classificação SIMCA para detectar adulterações e identificar o adulterante empregado. Uma vez identificado o adulterante, um modelo de calibração multivariada PLS-1 foi empregado para quantificar o teor de um determinado solvente adicionado à gasolina. Os conjuntos de calibração e validação para cada adulterante foram compostos por 24 e 6 amostras, respectivamente.

A Tabela 1 ilustra a percentagem de ocorrência de erros tipo I (amostra não classificada na classe a que pertence) e tipo II (amostra classificada numa classe em que não pertence) na classificação SIMCA. Em todos os casos avaliados a classificação SIMCA detectou a ocorrência de adulteração.

Tabela 1. Percentagem de erro na classificação SIMCA.

Adulterante	Percentagem de erro	
	Tipo I	Tipo II
Diesel	0	2
Querosene	0	33
Aguarrás	0	33
Tiner	0	20

Os resultados obtidos mostraram a impossibilidade de distinguir a adulteração por querosene e tiner por SIMCA ou por PLS-1. Por outro lado, as outras amostras que foram incorretamente classificadas como adulteradas por mais de um tipo de solvente, foram corretamente quantificadas por PLS-1, possibilitando identificar corretamente o adulterante empregado.

Os modelos de calibração PLS-1 apresentaram bons resultados de previsão dos teores de solvente nas amostras de validação (Tabela 2 e Figura 1), apresentado erro médio de previsão inferior a 2% em todas as análises.

Tabela 2. Resultados obtidos por PLS-1.

Adulterante	RMSEP	No. PCs
Diesel	1.8	5
Querosene	1.9	4
Aguarrás	1.8	3
Tiner	1.9	2

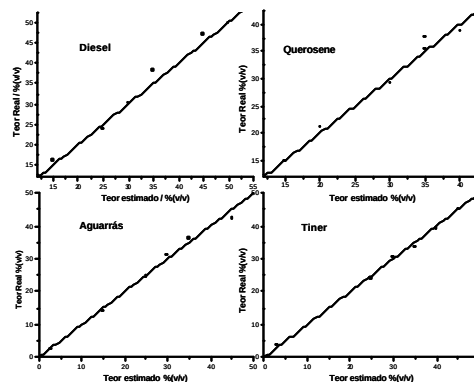


Figura 1. Validação dos modelos de calibração.

Conclusões

A metodologia proposta possibilitou a detecção de adulteração, identificação e quantificação do adulterante a partir dos espectros FT-IR, sendo uma ferramenta poderosa no combate a esse tipo de fraude.

Agradecimentos

CNPq, FINEP/CTPETRO, FAPESB.