

Nova estratégia para avaliação da qualidade das gasolinas comerciais brasileiras utilizando CG-DIC e ferramentas quimiométricas

Danilo Luiz Flumignan¹ (PG)*, Aristeu Gomes Tininis¹ (PG), Fabrício de Oliveira Ferreira¹ (PG), Márcia Nasser Lopes¹ (PQ), José Eduardo de Oliveira¹ (PQ).

¹CEMPEQC - Centro de Monitoramento e Pesquisa da Qualidade de Combustíveis, Petróleo e Derivados; Instituto de Química - UNESP; Rua Francisco Degni, s/n, Araraquara-SP, 14801-970; * flumigna@posgrad.iq.unesp.br

Palavras Chave: Gasolinas, Cromatografia, Quimiometria (SIMCA).

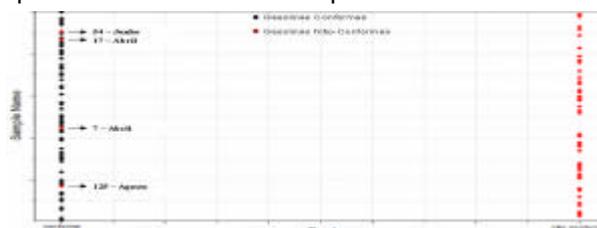
Introdução

A gasolina é uma mistura composta de hidrocarbonetos de variadas estruturas químicas e de diferentes grupos funcionais presentes em diferentes proporções, incluindo 25±1% de etanol.^{1,2} As gasolinas seguem um rígido processo de controle de qualidade, monitorado no Brasil pela Agência Nacional do Petróleo, de acordo com sua Portaria³ n.º. 309, que estabelece as características de conformidades que a gasolina deve apresentar para ser comercializada. Estas características são determinadas através dos parâmetros de densidade, destilação, teor alcoólico e octanagem. O objetivo deste trabalho foi desenvolver, otimizar e utilizar método cromatográfico – CG-DIC⁴ aliado a ferramentas quimiométricas – SIMCA⁵ com o intuito de correlacionar os perfis cromatográficos obtidos com a sua qualidade (conforme ou não conforme) utilizando 150 gasolinas comerciais da região Centro-Oeste do estado de São Paulo.

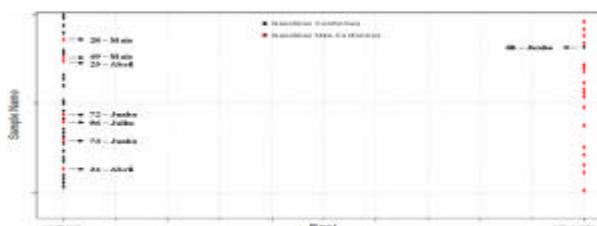
Resultados e Discussão

Foram analisadas 150 amostras de gasolinas através das normas vigentes³, sendo destas 53% conformes e 47% não conformes. Os parâmetros físico-químicos que caracterizaram inicialmente a qualidade destas amostras foram: cor, densidade, destilação 10%, 50%, 90%, PFE, resíduo, MON, RON, IAD, benzeno, aromáticos, saturados, olefinas e AEAC. As análises cromatográficas foram efetuadas em sistema CG-DIC – CBP1–PONA (50m – 0,15mm di e 0,42µm FE), com $t_{análise}$ de 78min⁴. Os dados experimentais obtidos foram analisados através do software *Pirouette 3.11* como uma matriz 458 x 150 x 1, representando as 458 variáveis (áreas integradas), 150 amostras e 1 classe (conformidade). Esta matriz foi dividida em dois conjuntos: treinamento e teste, sendo constituídos respectivamente de 100 e 50 amostras. O maior índice percentual de classificação das amostras foi obtido usando dados centrados na média e transformações normalizadas e logarítmicas. Foi observado em ambos os conjuntos (**Figura 1** e **2**) que 96% (96 e 48 amostras respectivamente) foram corretamente classificadas de acordo com sua 29ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

qualidade (conforme ou não conforme). Este percentual foi obtido no conjunto teste pois a maioria das amostras classificadas de forma contraditória apresentou resultados próximos aos limites



legislados e dentro do limite de confiabilidade do



método (**Tabela 1**).

Figura 1. Classificação do conjunto de treinamento.

Figura 2. Classificação do conjunto de teste.

Tabela 1. Parâmetros obtidos no conjunto de teste.

Amostra	Densidade	Destilação			PFE	MON	RON	IAD	Benz.	Sat.	Olef.	Arom.	AEAC	Res.
		10%	50%	90%										
Conjunto de Treinamento														
Amostras em Conformidade por SIMCA														
28 - Maio	0,7525	53,2	72,5	154,2	201,5	82,9	96,2	89,6	0,38	34,7	26,9	11,4	30*	1,0
49 - Maio	0,7566	53,1	73,7	173,2	221,0*	82,4	95,5	89,0	0,41	37,5	23,2	15,7	24	0,6
25 - Abril	0,7471	62,4	72,9	154,4	208,8	80,9*	92,5	86,7*	0,30	46,9	13,6	14,7	25	0,5
72 - Junho	0,7522	50,5	70,3	153,6	197,4	81,7*	94,2	88,0	0,39	45,6	15,0	14,9	25	0,8
96 - Julho	0,7453	55,2	72,2	155,7	193,4	81,6*	93,8	87,7	0,31	41,9	22,4	10,8	25	1,1
73 - Junho	0,7553	57,3	72,6	167,5	208,9	81,8*	94,6	88,2	0,42	45,0	14,9	16,1	25	0,6
24 - Abril	0,7500	58,5	73	172,7	210,6	81,8*	94,6	88,2	0,40	44,5	16,5	14,7	25	0,9
Amostras em Não Conformidade por SIMCA														
68 - Junho	0,7502	51,6	72,2	160,4	202,4	82,6	95,8	89,2	0,41	38,4	22,6	14,5	25	0,4

Conclusões

Foi concluído que os perfis cromatográficos obtidos podem ser correlacionados com a qualidade das gasolinas brasileiras, obtida através da Portaria n.º. 309, com confiança de 96%. O método de análise proposto foi considerado robusto, seletivo, além de apresentar baixo custo e tempo reduzido, visto a determinação ser realizada com apenas um experimento cromatográfico.

Agradecimentos



¹ Refinaria de Gabriel Passos, **Gasolina Automotiva**, Petrobrás **1997**.

² Ministério Agric., Pec. e Abastec., **Portaria nº 266**, D.O.U. **2002**.

³ Agência Nacional de Petróleo, **Portaria nº 309**, D.O.U. **2001**.

⁴ Flumignan, D. L.; et.al.. *28º SBQ Livro de Resumo*. **2005**, QA067.

⁵ Mellinger, M. *Chem. Int. Lab. Systems*. v. 2, p. 29-36, **1987**.