

Discriminação de Gasolinas Adulteradas Utilizando Técnicas Quimiométricas HCA e PCA em Dados de FTIR-ATR

Rita C. C. Pereira (PG)^{a*}, Eustáquio V. R. Castro (PQ)^b, Vânia M. D. Pasa (PQ)^a

rcassiap@yahoo.com.br

^aLaboratório de Ensaio de Combustíveis – Departamento de Química – ICEx Universidade Federal de Minas Gerais, Av. Antônio Carlos 6627, Belo Horizonte, Minas Gerais – Brasil CEP: 31.270-901 Tel: 55- 31- 3499-6650

^b Departamento de Química – Centro de Ciências Exatas – Universidade Federal do Espírito Santo. Avenida Fernando Ferrari, s/nº - CEP 29060-900 – Vitória – Espírito Santo – Brasil.

Palavras Chave: Adulteração, Gasolina, HCA

Introdução

Programas como o de Monitoramento da Qualidade dos Combustíveis, implantado pela ANP em praticamente todo o país, tem minimizado o problema da adulteração, que vem apresentando alto nível de sofisticação, principalmente no que tange à gasolina. A adição de solventes tais como xileno, refinado, ou frações petroquímicas como o querosene tem sido feita de tal forma que a gasolina permaneça dentro das especificações estabelecidas pelas portarias da ANP, não sendo possível a detecção do solvente, utilizando-se ensaios físico-químicos clássicos. Diante destes fatos, torna-se evidente a importância do desenvolvimento de métodos e técnicas analíticas mais simples, rápidas, eficientes e de baixo custo capaz de atestar a qualidade e a autenticidade dos combustíveis utilizados no Brasil [1]. Os métodos espectrométricos são potencialmente candidatos a preencher esses requisitos. Este trabalho visa avaliar o uso de dados da espectrometria no infravermelho e técnicas multivariadas como Análise de Componentes Principais (PCA) e Análise de Agrupamentos Hierárquicos (HCA) na segregação das amostras de gasolinas adulteradas com diferentes solventes numa concentração que variou de 1 a 30% v/v.

Resultados e Discussão

Para a construção dos modelos PCA e HCA foram utilizadas 120 amostras de gasolinas adulteradas com solvente aromático, querosene, nafta pesada e nafta leve numa faixa de 1 a 30% v/v, com variação de 1% v/v, foram utilizadas também 17 amostras de gasolinas não adulteradas. Obtiveram-se os espectros de infravermelho das 137 amostras de gasolinas adulteradas e não adulteradas no espectrômetro ABB Bomen modelo MB 102 (16 scans, resolução de 4 cm⁻¹ em um cristal de ZnSe)

Inicialmente, no conjunto de dados espectrais das amostras de gasolinas não adulteradas e adulteradas, realizou-se PCA com matriz de covariância. Observou-se que as amostras com concentrações de solvente inferior a 8% v/v

29ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

aglomeraram aleatoriamente, tendo sido retiradas da matriz de dados. Os resultados obtidos por PCA, mostraram uma segregação das amostras de gasolinas adulteradas com solvente aromático, querosene, nafta pesada, nafta leve das amostras de gasolinas não adulteradas.

Aplicando a Análise de Agrupamentos Hierárquicos (HCA) na matriz de dados espectrais, observou-se uma discriminação nítida das amostras de gasolinas adulteradas das amostras de gasolinas não adulteradas, conforme a Figura 1.

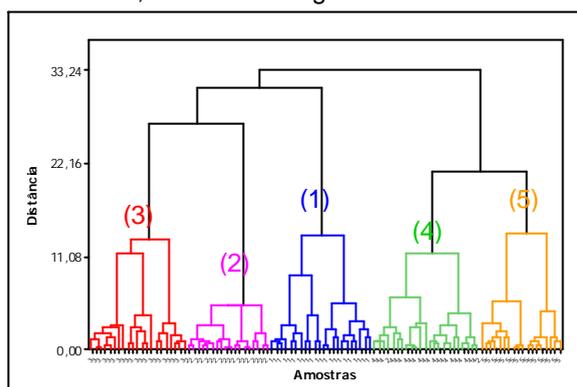


Figura 1. Dendrograma obtido com distância Euclidiana e critério de ligação Ward para as amostras de gasolinas adulteradas e não adulteradas.

A sensibilidade deste modelo foi tão grande que conseguiu agrupar espécies de mesma natureza como, por exemplo; nafta pesada (3) e querosene (2), nafta leve (5) e gasolina não adulterada (5) e ao mesmo tempo diferenciá-las nos grupos formados.

Conclusões

Concluiu-se que a metodologia desenvolvida, ou seja, o uso de espectrometria de infravermelho associada à PCA e HCA é uma técnica adequada para ser usada na discriminação de gasolinas adulteradas das não adulteradas. Especialmente devido à rapidez, baixo custo, fácil acesso e eficiência.

Agradecimentos

ANP, FINEP/CTPetro e a Capes

¹ Pereira, R. C. C.; Skrobot, V. L; Fortes, I. C. P; Castro, E. V. R.; Pasa, V. M. D. *Energy & Fuels*. 2006. in press.