

Discriminação das Regiões Geográficas de Comercialização das Gasolinas Brasileiras através da Análise Exploratória dos Perfis Espectrais de RMN ^1H .

Tainara R.M. Rigo¹(IC)*, Danilo L. Flumignan¹ (PG), Aristeu G. Tininis¹ (PQ), José E. de Oliveira¹ (PQ).

¹ CEMPEQC – 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. *danilo@iq.unesp.br

Palavras Chave: Gasolina, Quimiometria, RMN ^1H .

Introdução

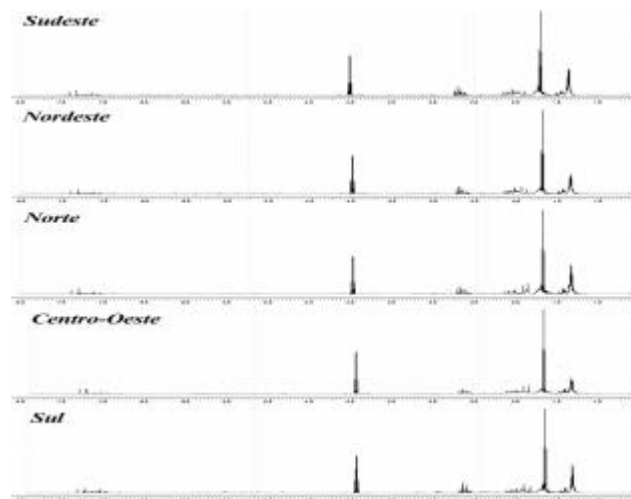
A gasolina é uma mistura de hidrocarbonetos líquidos sendo constituída por compostos variando entre quatro a treze átomos de carbono. A sua composição dependerá do processo e/ou das diferentes correntes petroquímicas usadas nas refinarias. Estas diferenças exercem grande influência em seu perfil espectral.

Neste cenário, trabalhos técnicos a respeito do processamento, transformação e misturas de diferentes correntes petroquímicas tem ganhado especial atenção^{1,2}. Este trabalho descreve a utilização da análise de componentes principais³ na diferenciação dos perfis espectrais e na obtenção de um método qualitativo para discriminação das regiões geográficas de comercialização das gasolinas produzidas nas refinarias brasileiras.

Resultados e Discussão

Foram analisadas 72 amostras provenientes de diferentes regiões (21 da região Sudeste, 18 do Nordeste, 15 do Norte, 10 do Centro-Oeste e 8 do Sul) utilizando um espectrômetro de RMN VARIAN INOVA 500 MHz a 303,1K e com uma “probe broadband” de 5mm. Os perfis espectroscópicos obtidos (**Figura 1**) foram analisados com o software Pirouette, usando uma matriz 26713 x 72 x 1, representando as variáveis, amostras e regiões. As variáveis foram auto-escaladas, normalizadas e submetidas à transformação logarítmica, sendo realizada seleção para melhor discriminação das regiões. A seleção removeu as faixas espectrais de baixa discriminação aumentando o poder de classificação.

A análise de componentes principais classificou cinco conjuntos distintos de acordo com a origem comercial da região (**Figura 2**), sendo que 88,8% da variância total foi descrita pelas duas primeiras componentes principais. O grupo superior de amostras do norte (cinza) é discriminado claramente dos outros, exceto das amostras da região sul (azul) onde há uma leve sobreposição entre algumas amostras. As amostras do nordeste (rósea) encontram-se dispersas, porém separadas dos outros conjuntos. Já as amostras das regiões sudeste (verde) e centro-oeste (vermelha) encontram-se



sobrepostas. Este fato ocorre porque não existe refinaria na região centro-oeste.

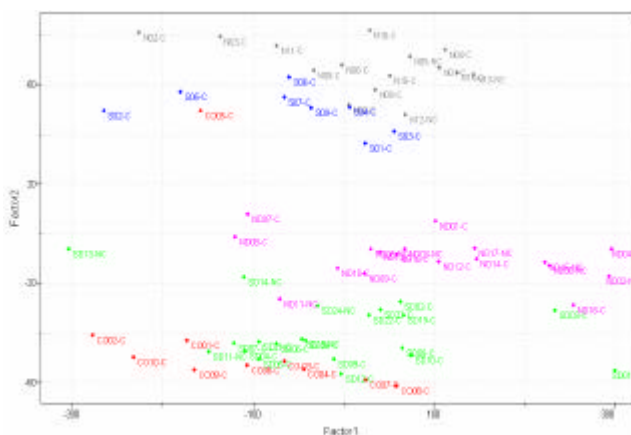


Figura 1. Espectro típico de amostras de gasolinas comerciais provenientes de diferentes regiões.

Figura 2. CP1xCP2 das amostras de gasolinas.

Conclusões

A análise exploratória mostrou que os perfis espectroscópicos relacionados a ferramentas quimiométricas apresentam uma grande vantagem em diferenciar amostras comerciais de gasolinas de acordo com a suas origens geográficas. A vantagem deste método está no tempo reduzido de análise e no volume reduzido de amostra.

Agradecimentos



¹ Rebouças, M. V.; Gomes, A. T.; Teixeira, L. S. G., *2º Congresso Brasileiro de P & D em Petróleo & Gás*, Rio de Janeiro - RJ, **2003**.

² Dias, J. C. M.; de Aguiar, P. F., *10th International Conference on Chemometrics in Analytical Chemistry*, Águas de Lindóia - SP, **2006**.

³ Geladi, P.; Kowalski, B.R. *Anal. Chim. Acta.* v. 185, p. 1-17, **1986**.