

Correlação entre composição química e parâmetros de qualidade de gasolinas tipo A do Estado do Pará, usando quimiometria e CG-FID.

Fábio I. M. Carvalho ¹(PG), Heronides A. Dantas Filho ¹(PQ), Miguel Braga ¹(PQ), Paulo R. S. Batista ¹(PQ), Abílio F. B. Santos ¹(IC), Leane S. Bahia ¹(IC), Geraldo N. da Rocha Filho ¹(PQ), José R. Zamian ¹(PQ).

*herondantas@gmail.com

1- Faculdade de Química - Universidade Federal do Pará – UFPA.

Palavras Chave: Gasolina, Propriedades físico-químicas, composição química, qualidade, correlação, CG-FID.

Introdução

O controle e a melhoria da qualidade da gasolina e demais combustíveis obtidos do petróleo é uma preocupação constante na refinaria, garantindo o bom desempenho dos veículos que a utilizam, minimizando os impactos ambientais de sua queima e ainda evitando uma série de gastos econômicos, decorrentes de um maior consumo de combustível e desgastes dos motores^[1]. Devido a isso são empregados vários procedimentos de melhoria das características do combustível, utilizando principalmente o conhecimento químico, que pode ser subjetivo e levar a interpretação incoerente. O presente trabalho utiliza ferramentas da quimiometria, na busca de correlações entre os parâmetros físico-químicos (massa específica, destilação, MON e IAD) e a composição química das classes de olefinas, aromáticos, parafinas, iso-parafinas e naftênicos existentes em gasolinas tipo A (isenta de AEAC). Foram coletadas 3 triplicatas de 6 amostras correspondentes a 6 distribuidoras da cidade de Belém-PA. Os ensaios físico-químicos foram realizados segundo métodos oficiais ASTM e NBR. A composição química foi determinada por cromatografia gasosa com detector de ionização de chama (CG/FID) com o auxílio do software Detailed Hydrocarbon Analysis (DHATM), determinando-se a quantidade de compostos contendo mais de 14 átomos de carbono (>C-14), parafínicos, iso-parafínicos, aromáticos, naftênicos, olefinas e oxigenados e desconhecidos, apresentados na tabela 1:

Tabela1. Composição química de hidrocarbonetos da gasolina tipo A.

Classes de compostos	Composição (%v/v)
Aromáticos	16,97
Iso-parafinas	23,90
naftênicos	15,62
olefinas	17,81
parafinas	14,54
>C-14	0,022
oxigenados	0,47

desconhecidos	10,65
---------------	-------

Os dados obtidos das análises foram transportados para o programa Statistica 6.0 e realizada a análise de correlação entre as variáveis estudadas, apresentada na figura 1.

Variável	T10	T90	dens	MON-IV	arom-IV	olefinas-IV	iso-paraf-CG
T10	1,000000	-0,835227	-0,834753	-0,771150	0,147773	-0,943950	0,257643
T90	-0,835227	1,000000	0,952387	0,719536	-0,129428	0,920143	-0,480672
dens	-0,834753	0,952387	1,000000	0,754954	-0,029735	0,897829	-0,514443
MON-IV	-0,771150	0,719536	0,754954	1,000000	0,876523	0,843089	-0,176762
arom-IV	0,147773	-0,129428	-0,029735	0,876523	1,000000	-0,082521	-0,103630
olefinas-IV	-0,943950	0,920143	0,897829	0,843089	-0,082521	1,000000	-0,233054
iso-paraf-CG	0,257643	-0,480672	-0,514443	-0,176762	-0,103630	-0,233054	1,000000

Figura1. Tabela de correlação entre variáveis físico-químicas e composição química.

Resultados e Discussão

Entre as interpretações obtidas da figura 1, pode ser destacado o comportamento sinérgico entre o teor de aromáticos e a octanagem da gasolina (MON-IV), cuja correlação foi positiva e com valor de 0,876523, confirmando as interpretações obtidas de estudos da literatura^[1,2]. Comportamento semelhante observa-se também entre as variáveis T-90 e massa específica (densidade), com correlação positiva de 0,952387.

Conclusões

O uso de quimiometria, por meio do uso de tabela de correlação entre composição química e propriedades físico-químicas, não só de gasolinas como também de outros combustíveis oriundos do petróleo e demais fontes de energia, tais como biocombustíveis, pode fornecer informações importantes que venham a confirmar ou não conhecimentos químicos a respeito do melhoramento de formulação de combustíveis e biocombustíveis.

Agradecimentos

UFPA, CNPq/Sedect, ANP, FADESP.

[1] Ramadhan, O. M. et al ; Petroleum Science and Technology; 17 (1999), 607-621.

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

[2] Lilian, C. C. et al; Chemometrics and intelligent laboratory systems; 76 (2005), 55-63.