

1. CAMPOS, ANTÔNIO CLARET.; LEONTSINIS, EPAMINONDAS. Petróleo e Derivados. RJ. JR Editora Técnica. 1990.
2. STRAUGHAN, B.P.; WALKER, S. Spectroscopy vol. II. N.Y: John Willey & Sons Inc. 1976.
3. S. C. A.TÉLLEZ. Simetria molecular e Aplicações na Espectroscopia Infravermelho e Raman. Londrina, Paraná. CNPQ, SBQ,FUEL. 1983.
4. SALA, OSWALDO. Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho. S. P. Editora da Universidade Estadual Paulista. 1996.
5. WHITE, R. C. Handbook of Industrial Infrared Analysis. N.Y. Plenum Press 1964
6. FRAN, ADAR.; GEIGER, RUTH.; NOONANN, JON. Spectroscopy for Process/Quality Control. Applied Spectroscopy 1e 2 45-101 1997.
7. H, C. TSAI.;D. B. BOGY. J. Vac. Sci. Technol. A5(6) 3287- 3312.
8. CZARNECKI,J.V.; H, W. HIMSH. L'actualite Chimique, 55-56 (Avril 1980)
9. N, J. POTHIER.;R,K. FORCE. Anal. Chem. 62, 456-460. 1981.
10. M, D'ORAZIO.;U. SCHIMP. Anal. Chem. 53, 809-812. 1981
11. ANGEL, S. M.COONEY.; SKINER, H. T. European Symposium on Optics for Environmental and Public Safety. Mnich. 1995
- 12.COOPER, B. JOHN; FLECHER, PHILIP; E, ALBIN; SACHARIA, WELCH; T, WILLIAM. Spectrochimica Acta Part A 53 p 199-206. 1997.
- 13.KELLY, JEFREY; J., BARLEY; CLYDE, H.; JINGUIFI; THOMAS,M.; CALLIS, JAMES. Anal. Chem., 61, p313-320. 1989.
- 14.AKER, CRISTOPHER J.;FREDERICS, PETER M. Applied Spectroscopy 49, 12, p 1766. 1995
- 15.KU, MIN SIK; CUNG, HOEIL. Applied Spectroscopy v-53, 5,. 1999
- 16.KRAMER, RICHARD. Chemometric Techniques for Quantitative Analysis. Marcel Dekker Inc. N.Y. 1998.

17. GELADS, PAUL; KOLWALSKI, BRUCE. *Analitica Chemica Acta*, 185, p1-17. 1986.
18. MILIDIÚ, R.L.; RENTERIA, R.P. DPLS and PPLS: two algorithms for large data sets. Pontificia Universidade Católica RJ. Brasil.
19. DE LA GUARDIA, MIGUEL; GARRIGUES, S. *Analitica Chimica Acta* 279 p267-274. 1995.
20. NETO, B.B.; SCARMÍNIO, I.S.; BRUNS, R.E. *Planejamento e Otimização de Experiências*. Ed. da Universidade Estadual de Campinas-UNICAMP. Campinas, SP. 1995.
21. ADAMS, MIKE J. *Chemometrics in Analytical Spectroscopy*. Thomas Graham House. Royal Society of Chemistry. U.K. 1995
22. ANTON, HOWARD. *Elementary Linear Algebra*. John Willey and Sons Inc. N.Y. 1994.
23. SKOOG, LEARY. *Principles of Instrumental Analysis*. Saunders College Publisher. N.Y. 1992.
24. FIGUEREIDO, OTÁVIO H.S. *Comparação de Técnicas Multivariadas e Regressão Aplicadas a Calibração Multidimensional*. Instituto de Matemática. UFRJ. RJ. 1995.
25. FILHO, P. C. *Algoritmo Genético na Seleção de variáveis em calibração Multivariada de Dados Espectroscópicos*. Dissertação de Mestrado. Instituto de Química UNICAMP. CAMPINAS SP. 1998.

Apêndice A

Tabela A.1 – Composição de gasolinas sintéticas

	etanol	n-hept	isooct	tolu	benz	o-xil	m-xil	p-xil	c-hexa	c-hexe	satu	arom
C01	29,74	15,09	11,77	3,34	1,13	3,38	2,10	2,37	9,95	21,12	36,82	12,31
C02	23,88	20,02	8,91	6,80	2,32	3,40	4,54	3,40	10,11	16,63	39,04	20,46
C03	23,70	22,45	10,88	2,19	0,00	3,40	3,34	4,26	6,25	23,51	39,58	13,20
C04	27,01	21,64	7,35	3,03	0,00	4,09	1,98	2,07	7,33	25,50	36,31	11,17
C05	30,01	18,93	9,13	2,23	2,30	2,25	2,29	4,37	5,94	22,54	33,99	13,45
C06	19,38	15,00	7,97	6,71	2,20	2,22	4,39	2,25	16,80	23,07	39,77	17,77
C07	19,82	17,16	8,22	2,27	1,16	2,31	4,48	4,64	24,84	15,09	50,22	14,87
C08	27,91	20,58	10,68	5,66	1,13	4,51	2,33	4,37	6,06	16,78	37,32	17,99
C09	27,33	15,05	10,65	6,67	2,24	4,47	3,24	4,41	1,14	24,79	26,85	21,03
C10	25,63	16,72	11,66	3,37	2,25	4,47	3,25	3,32	12,21	17,11	40,60	16,66
C11	21,68	22,44	11,82	3,42	1,14	3,44	3,47	2,19	6,63	23,76	40,90	13,66
C12	28,00	20,65	8,82	5,71	0,00	4,53	3,36	2,34	3,00	23,60	32,47	15,93
C13	20,99	18,41	8,02	2,18	2,24	3,35	4,37	2,22	19,76	18,45	46,19	14,36
C14	29,32	22,94	8,40	3,52	2,37	3,51	2,36	2,32	3,31	21,95	34,65	14,08
C15	25,55	16,62	10,74	6,78	1,14	3,35	4,44	3,32	5,01	23,06	32,37	19,02
C16	25,48	15,36	9,01	2,23	0,00	3,37	3,21	2,19	13,88	25,26	38,26	11,00
C17	28,84	21,38	8,83	5,65	1,11	2,27	2,24	3,35	2,02	24,31	32,23	14,62
C18	19,62	22,06	9,38	6,75	0,00	4,53	2,25	4,44	12,23	18,74	43,67	17,97
C19	23,43	15,47	11,69	5,61	1,15	3,34	4,30	4,51	12,06	18,44	39,23	18,90
C20	29,92	22,27	10,83	5,62	2,27	2,26	3,39	2,23	1,95	19,27	35,04	15,77
C21	23,63	15,12	7,89	2,24	0,00	4,45	3,38	3,20	19,40	20,69	42,41	13,27
C22	23,91	19,60	8,31	3,43	1,14	4,58	3,37	4,52	3,26	27,87	31,18	17,04
C23	19,88	21,01	11,94	2,25	0,00	2,23	2,29	4,55	8,01	27,84	40,96	11,31
C24	26,36	15,98	8,45	6,45	1,09	4,26	4,18	3,24	4,08	25,91	28,51	19,21
C25	19,92	16,42	11,48	5,67	1,20	5,15	2,29	1,12	15,57	21,19	43,46	15,43
C26	20,50	16,20	7,81	6,27	2,31	3,28	4,27	3,19	12,42	23,74	36,44	19,32
C27	27,78	19,07	11,68	3,26	0,00	2,12	4,42	4,57	8,10	19,00	38,85	14,36
C28	19,78	23,61	11,03	2,39	1,08	4,66	4,54	2,24	5,13	25,53	39,78	14,92
C29	21,46	24,80	8,68	6,54	1,02	2,33	3,45	2,27	8,15	21,30	41,63	15,60
C30	23,76	20,66	11,17	3,32	2,26	4,70	4,68	3,48	0,98	25,00	32,81	18,43
C31	25,97	23,98	10,84	5,63	0,00	3,44	4,55	3,33	1,03	21,24	35,85	16,94
C32	29,45	16,80	10,83	6,83	0,00	2,18	4,49	2,25	0,00	27,18	27,62	15,74
C33	24,41	23,71	7,87	4,27	2,36	3,33	3,39	3,35	1,01	26,29	32,59	16,70
C34	22,16	19,34	10,79	2,59	2,09	2,29	2,30	3,42	7,18	27,84	37,31	12,69
C35	21,38	18,86	12,09	5,27	0,00	2,38	3,39	3,38	16,34	16,89	47,30	14,43
C36	25,81	20,53	8,21	3,36	0,93	2,16	3,39	3,40	13,19	19,02	41,93	13,23
	etanol	n-hept	isooct	tolu	benz	o-xil	m-xil	p-xil	c-hexa	c-hexe	satu	arom
T01	22,96	19,64	9,52	4,52	1,30	3,43	3,43	3,38	9,76	22,07	38,91	16,06
T02	22,27	19,97	9,84	4,57	1,03	3,80	3,26	3,36	9,84	22,06	39,65	16,02
T03	22,40	19,51	10,07	4,49	1,37	3,73	3,33	3,33	9,73	22,04	39,32	16,25
T04	22,93	19,53	9,66	4,31	1,12	3,31	3,39	3,38	9,86	22,52	39,05	15,51
T05	23,00	19,60	9,97	4,54	1,20	3,40	3,37	3,38	9,71	21,82	39,27	15,90
T06	23,34	20,44	8,85	6,73	2,34	3,40	4,49	3,42	10,03	16,97	39,32	20,37
T07	21,58	22,57	11,55	3,50	1,15	3,50	3,34	2,23	7,07	23,51	41,20	13,72
T08	28,74	18,75	9,52	6,02	0,00	2,43	4,67	2,37	3,26	24,25	31,52	15,49
T09	25,58	18,51	10,65	6,85	1,15	3,45	2,16	3,35	5,07	23,23	34,23	16,96
T10	28,76	22,05	8,44	5,66	1,17	2,30	2,24	3,31	1,86	24,20	32,35	14,69
T11	23,39	13,59	9,27	2,19	0,00	4,58	3,38	3,37	19,30	20,93	42,16	13,53
T12	19,62	20,43	11,74	3,43	0,00	2,23	2,32	4,43	8,16	27,64	40,33	12,41
T13	27,81	17,02	8,71	2,37	1,09	4,68	4,45	3,36	4,10	26,43	29,83	15,93
T14	22,75	23,82	8,76	6,69	1,17	2,30	3,39	2,23	7,98	20,92	40,56	15,77
T15	22,61	23,14	10,54	3,46	2,26	4,57	4,57	3,46	0,99	24,40	34,67	18,32
T16	25,65	24,17	10,92	5,69	0,00	3,39	4,53	3,39	1,12	21,14	36,21	17,00

Tabela A.2 – Composição de gasolinas comerciais

	drel 20/4C	PEI(C)	PE10%(C)	PE50%(C)	PE90%(C)	PEF(C)	EtOH%v/v
g1081	0,7545	44,4	56,1	73,9	174,8	211,0	24,0
g1083	0,7544	44,7	56,9	74,1	173,6	208,4	23,0
g1085	0,7542	45,3	56,1	73,8	173,4	208,9	23,0
g1086	0,7549	45,6	56,6	74,0	173,0	208,6	23,0
g1090	0,7547	44,6	56,8	74,0	173,7	206,0	23,0
g1091	0,7556	45,2	57,8	74,2	175,3	208,8	24,0
g1095	0,7561	44,4	57,9	74,4	175,5	209,7	23,0
g1096	0,7539	44,2	56,6	73,9	174,4	210,2	23,0
g1098	0,7562	46,5	57,9	74,1	174,1	209,8	24,0
g1294	0,7559	44,6	57,7	74,1	175,2	208,2	24,0
g1298	0,7560	45,2	57,5	73,5	175,2	211,2	23,0
g1302	0,7462	47,0	57,8	73,3	174,5	212,4	24,0
g1305	0,7598	45,1	56,7	73,6	178,8	213,1	23,0
g1315	0,7562	44,9	57,8	73,7	174,8	210,4	24,0
g1322	0,7561	45,2	57,1	73,4	174,6	210,9	23,0
g1328	0,7551	47,0	56,9	73,4	171,5	211,7	23,0
g1335	0,7558	46,2	57,5	73,5	175,0	209,3	23,0
g1338	0,7557	45,6	57,5	73,5	173,5	214,3	23,0
g1342	0,7548	44,7	57,3	73,9	175,8	212,1	23,0
g1493	0,7564	46,4	57,6	73,6	177,3	214,2	23,0
g1495	0,7547	45,7	57,3	72,0	171,8	211,6	23,0
g1497	0,7547	45,3	57,4	73,5	172,6	210,2	24,0
g1504	0,7562	45,6	57,5	73,1	170,9	210,1	23,0
g1506	0,7554	46,3	57,1	73,5	171,2	213,6	23,0
g1507	0,7559	44,7	57,0	72,8	169,3	208,6	23,0
g1508	0,7565	45,7	57,2	72,6	171,3	210,3	23,0
g1510	0,7578	44,6	59,1	73,7	165,6	198,5	23,0
g1513	0,7554	43,0	56,2	73,8	170,5	211,8	23,0
g1633	0,7508	41,8	52,5	73,4	172,7	208,0	23,0
g1634	0,7562	44,4	57,0	73,2	172,2	208,7	24,0
g1637	0,7582	41,9	53,4	72,4	170,5	207,2	23,0
g1640	0,7505	41,9	54,5	73,2	171,1	208,8	23,0
g1643	0,7576	45,9	56,8	72,8	173,6	214,8	23,0
g1644	0,7566	45,3	56,8	73,9	177,1	218,0	23,0
g1647	0,7574	45,1	56,8	72,8	172,8	212,3	23,0
g1650	0,7585	45,6	57,3	72,9	174,6	214,1	23,0
g1651	0,7556	45,5	56,9	72,9	175,0	210,8	24,0
g1654	0,7590	45,3	57,4	72,9	174,1	211,2	23,0
g1657	0,7503	42,6	55,7	73,7	173,7	211,4	23,0
g1660	0,7587	45,5	57,7	72,8	174,9	216,1	23,0
g1677	0,7585	44,6	57,4	72,8	175,4	212,9	23,0
g1698	0,7588	45,4	57,1	72,8	173,6	213,4	23,0
g1709	0,7573	45,4	57,9	73,1	173,8	212,6	23,0
g1728	0,7553	44,6	56,3	72,8	170,0	212,1	23,0
g1731	0,7600	44,4	57,0	73,4	172,0	218,6	23,0
g1734	0,7585	45,0	57,8	73,0	174,7	212,9	23,0
g1736	0,7570	44,9	58,9	74,2	158,8	193,7	23,0
g1738	0,7602	46,1	57,5	73,0	177,8	214,6	23,0
g1740	0,7538	43,3	55,9	73,7	176,4	219,4	23,0
g1742	0,7598	44,5	59,6	74,2	155,1	193,9	23,0
g1744	0,7579	43,2	58,2	74,1	160,7	199,1	23,0
g1746	0,7583	45,4	57,3	73,1	174,7	214,8	23,0
g1748	0,7576	44,7	56,5	72,9	176,1	213,6	23,0
g1749	0,7593	46,1	57,2	73,1	175,1	214,7	23,0
g1750	0,7589	44,4	58,2	73,5	175,0	216,7	24,0
g1753	0,7579	42,1	56,9	73,1	174,3	213,1	23,0
g1758	0,7604	43,8	57,6	73,0	175,8	219,7	23,0
g1761	0,7595	43,9	57,1	73,0	175,0	215,1	23,0
g3165	0,7581	43,8	57,5	73,3	174,1	213,7	24,0
g3168	0,758	46,3	58,2	73,3	177,9	218,7	25,0
g3171	0,7478	42,2	53,8	72,2	160,7	200,3	24,0
g3174	0,7576	45,6	58,2	73,2	175,1	217,5	24,0
g3178	0,7531	43,5	57,3	72,9	169,1	209,4	25,0
g3182	0,7566	47,2	58,3	73,4	175,3	216,3	24,0
g3184	0,7567	44,8	58,1	73,2	174,4	215,8	24,0
g3185	0,7567	46,6	57,9	73	175,4	216,5	24,0
g3187	0,7574	46,5	58	72,9	175,3	214,8	25,0
g3190	0,7376	44,5	53,4	70,1	156	195,5	25,0

Tabela A.2 continuação

	EtOH	benz	arom	olef	satu	MON	RON
g1081	22,0	0,20	12,4	22,3	43,3	81,9	94,1
g1083	22,5	0,23	13,1	20,2	44,2	82,7	95,2
g1085	22,7	0,20	13,9	20,1	43,3	82,3	94,7
g1086	22,8	0,25	13,8	16,6	46,8	82,3	93,5
g1090	23,3	0,19	13,2	20,0	43,5	82,3	94,8
g1091	23,2	0,21	13,2	20,8	42,8	82,5	95,1
g1095	23,6	0,23	14,3	22,2	39,9	82,6	95,3
g1096	23,0	0,21	12,9	19,0	45,1	82,8	96,2
g1098	23,1	0,24	13,3	19,9	43,7	82,5	95,1
g1294	22,5	0,27	12,9	16,3	48,3	82,6	94,8
g1298	23,2	0,25	14,0	19,4	43,4	82,7	95,1
g1302	23,5	0,27	13,6	19,4	43,5	82,7	95,2
g1305	23,2	0,29	15,3	23,1	38,4	83,3	96,2
g1315	23,3	0,28	13,7	20,0	43,0	82,9	95,6
g1322	22,7	0,31	14,3	18,4	44,6	83,3	95,7
g1328	22,5	0,26	13,2	19,0	45,3	82,8	95,1
g1335	22,8	0,29	14,2	21,3	41,7	83,0	95,5
g1338	22,7	0,34	14,3	21,6	41,4	82,4	94,8
g1342	23,1	0,25	13,5	20,9	42,5	82,8	95,4
g1493	22,1	0,30	14,2	21,8	41,9	82,8	95,0
g1495	22,5	0,30	14,9	21,0	42,6	83,3	95,7
g1497	23,4	0,28	13,7	23,0	39,9	83,2	95,7
g1504	23,3	0,29	13,4	21,0	42,3	83,0	95,3
g1506	22,8	0,30	14,3	21,1	41,8	83,0	95,4
g1507	23,1	0,31	13,4	20,5	43,0	83,3	95,6
g1508	23,0	0,24	13,8	19,6	43,6	82,8	96,2
g1510	23,8	0,29	18,5	13,9	43,8	81,4	93,0
g1513	22,9	0,22	12,5	21,7	42,9	82,8	95,2
g1633	22,0	0,20	11,4	19,6	47,0	82,2	94,1
g1634	22,8	0,28	13,7	18,8	44,7	82,5	95,3
g1637	22,6	0,37	15,4	19,1	42,9	83,6	96,1
g1640	23,0	0,20	12,7	19,9	44,4	82,4	94,4
g1643	23,0	0,33	15,5	17,3	44,2	83,5	95,9
g1644	22,7	0,28	14,1	20,3	42,9	82,9	95,5
g1647	22,3	0,36	16,0	18,4	42,8	82,0	94,6
g1650	22,6	0,33	15,6	21,5	40,3	83,2	95,7
g1651	22,9	0,27	14,1	17,2	45,8	82,8	95,1
g1654	22,5	0,40	15,5	18,1	43,9	82,6	96,3
g1657	22,7	0,27	11,9	21,3	44,1	82,6	95,6
g1660	22,8	0,35	15,2	18,1	43,9	83,5	96,0
g1677	23,6	0,37	16,4	21,9	38,1	83,5	96,3
g1698	23,2	0,37	16,3	20,9	39,6	83,4	96,0
g1709	23,3	0,30	15,5	22,6	38,6	83,1	95,6
g1728	21,7	0,29	13,9	16,6	47,8	83,0	94,9
g1731	22,3	0,40	17,2	18,9	41,6	83,2	95,6
g1734	22,6	0,37	15,5	23,1	38,8	83,4	96,1
g1736	22,6	0,50	19,9	14,3	43,2	81,8	93,5
g1738	22,3	0,40	15,7	21,4	40,6	83,6	96,2
g1740	21,9	0,27	13,4	16,8	47,9	82,5	94,5
g1742	24,4	0,49	20,5	8,9	46,2	81,7	93,4
g1744	23,2	0,35	20,2	12,6	44,0	81,4	93,0
g1746	22,6	0,37	16,1	21,3	40,0	83,5	96,1
g1748	22,5	0,38	15,8	19,5	42,2	83,7	96,4
g1749	22,1	0,42	16,1	19,2	42,6	84,0	96,6
g1750	22,7	0,38	15,6	18,4	43,3	83,8	96,3
g1753	23,0	0,38	16,1	24,3	36,6	83,5	96,3
g1758	22,8	0,33	16,2	19,6	41,4	83,4	95,9
g1761	22,7	0,37	16,0	21,1	40,2	83,7	96,5
g3165	25,5	0,28	13	27,5	34	81,6	95,5
g3168	25,2	0,29	14,3	27,8	32,7	82	95,7
g3171	25,6	0,45	14,3	21,2	38,9	82,1	96
g3174	25,5	0,27	14,4	24,2	35,9	82,2	95,7
g3178	25,7	0,31	13,8	25,3	35,2	82,1	95,4
g3182	25,7	0,31	13,3	25,8	35,2	81,9	95,5
g3184	25,3	0,29	13,1	23,1	38,5	81,8	95,7
g3185	25,3	0,28	13,8	23,1	37,8	81,6	95,5
g3187	25,5	0,33	13,6	25,3	35,6	81,9	95,7
g3190	25,4	0,28	9,5	24,7	40,4	81,8	94,7

A seguir, são apresentadas os valores médios (Me), desvios-padrão (DP) e coeficientes de variação (CV em %) para todas as propriedades estudadas nas gasolinas sintéticas e comerciais.

Gasolinas comerciais

	Drl	PEI	PE10%	PE50%	PE90%	PEF	EtOHv/v	EtOHIR	BENZ	AROM	OLEF	SATU	MON	RON
Me	0,7560	44,90	57,10	73,30	172,80	211,1	23,40	23,20	0,31	14,50	20,30	41,90	82,70	95,30
DP	0,0035	1,25	1,24	0,65	4,72	5,48	0,59	1,05	0,07	1,89	3,20	3,35	0,65	0,82
CV	0,4700	2,79	2,18	0,88	2,73	2,60	2,54	4,51	22,32	12,98	15,71	7,99	0,78	0,86

Gasolinas sintéticas

	Etan	n-hept	Isooct	Tolu	BENZ	o-xil	m-xil	p-xil	c-hexa	c-hexe	SATU	ARON
Me	24,36	19,59	9,84	4,51	1,12	3,39	3,46	3,23	8,12	22,38	37,55	15,71
DP	3,20	2,91	1,38	1,67	0,86	0,90	0,86	0,84	5,73	3,27	4,90	2,42
CV	13,12	14,85	14,03	36,95	77,07	26,59	24,98	26,10	70,52	14,62	13,05	15,40

Drl: densidade relativa

PEI: ponto de ebulição inicial

PE10%: ponto de ebulição 10% de evaporado

PE50%: ponto de ebulição 50% de evaporado

PE90%: ponto de ebulição 90% de evaporado

PEF: ponto de ebulição final

EtOHv/v: % de etanol ¼. Método na proveta

EtOHIR: % de etanol de determinado pelo equipamento IROX

BENZ: % de Benzeno

AROM: % de aromáticos

OLEF: % de olefinas

SATU: % de saturados

MON: número de octano motor

RON: número de octano pesquisa

n-hept: % de n-heptano

Isooct: % de Isooctano

Tolu: % de Tolueno

o-xil: % de o-xileno

m-xil: % de m-xileno

p-xil: % de p-xileno

c-hexa: % de ciclo-hexano

c-hexe: % de ciclo-hexeno

Me: média aritmética

DP: desvio padrão

CV: coeficiente de variação

Apêndice B

Tabelas de valores de referência (gravimetria) e Raman para as propriedades estudadas nas misturas sintéticas

Tabela B1 – Teor % de etanol - calibração

Amostra	Referência	Raman
C01	29,74	29,77
C02	23,88	23,69
C03	23,70	23,69
C04	27,01	27,13
C05	30,01	29,92
C06	19,38	19,48
C07	19,82	19,82
C08	27,91	27,68
C09	27,34	27,43
C10	25,63	25,76
C11	21,68	21,77
C12	28,00	28,11
C13	20,99	21,01
C14	29,32	29,17
C15	25,55	25,64
C16	25,48	25,57
C17	28,84	28,91
C18	19,62	19,82
C19	23,43	23,45
C20	29,92	30,08
C21	23,63	23,71
C22	23,91	23,64
C23	19,88	19,87
C24	26,37	26,41
C25	19,92	19,84
C26	20,50	20,55
C27	27,79	27,70
C28	19,78	19,70
C29	21,46	21,50
C30	23,76	23,68
C31	25,97	25,97
C32	29,45	29,43
C33	24,41	24,59
C34	22,16	22,03

Tabela B2 – Teor % de etanol - validação

Amostra	Referência	Raman
C01	29,74	28,90
C02	23,88	22,33
C03	23,70	24,51
C04	27,01	25,99
C05	30,01	28,88
C06	19,38	19,95
C07	19,82	20,00
C08	27,91	27,12
C09	27,34	27,46
C10	25,63	26,13
C11	21,68	22,05
C12	28,00	27,83
C13	20,99	21,18
C14	29,32	29,67
C15	25,55	26,42
C16	25,48	25,45
C17	28,84	28,80
C18	19,62	20,33
C19	23,43	23,87
C20	29,92	30,82
C21	23,63	23,74
C22	23,91	24,34
C23	19,88	20,13
C24	26,37	26,11
C25	19,92	19,95
C26	20,50	20,46
C27	27,79	27,37
C28	19,78	19,86
C29	21,46	21,47
C30	23,76	23,70
C31	25,97	25,72
C32	29,45	29,20

Tabela B3 – Teor % de etanol – predição

Amostra	Referência	Raman
T01	22,96	22,83
T02	22,27	22,95
T03	22,40	22,52
T04	22,93	23,39
T05	23,01	22,82
T06	23,34	22,95
T07	21,58	21,35
T08	28,74	27,65
T09	25,58	25,16
T10	28,76	27,97
T11	23,39	22,36
T12	19,62	19,43
T13	27,81	26,71
T14	22,75	22,03
T15	22,61	22,54
T16	25,65	25,74

Tabela B4 – Teor % etanol - Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9596	0,2373
Validação	0,9448	0,1027
Predição	0,9560	0,5899

Tabela B5 – Teor % de n-heptano – calibração

Amostra	Referência	Raman
C01	15,09	14,94
C02	20,02	19,65
C03	22,45	22,39
C04	21,64	21,71
C05	18,93	19,24
C06	15,00	15,40
C07	17,16	17,47
C08	20,58	20,81
C09	15,05	15,38
C10	16,72	16,80
C11	22,45	22,38
C12	20,65	21,00
C13	18,41	18,93
C14	22,94	22,62
C15	16,62	15,94
C16	15,36	14,84
C17	21,38	20,79
C18	22,06	21,35
C19	15,47	15,68
C20	22,27	23,01
C21	15,12	15,53
C22	19,60	18,77
C23	21,01	21,23
C24	15,98	16,14
C25	16,42	16,80
C26	16,21	16,94
C27	19,07	19,25
C28	23,61	23,27
C29	24,80	24,57
C30	20,66	21,05
C31	23,98	24,23
C32	16,80	16,62
C33	23,71	24,22
C34	19,34	19,35
C35	18,87	17,97
C36	20,53	19,67

Tabela B6 – Teor % de n-heptano – validação

Amostra	Referência	Raman
C01	15,09	15,51
C02	20,02	19,45
C03	22,45	22,10
C04	21,64	21,40
C05	18,93	19,27
C06	15,00	15,84
C07	17,16	17,47
C08	20,58	20,68
C09	15,05	15,98
C10	16,72	16,96
C11	22,45	22,82
C12	20,65	21,17
C13	18,41	18,94
C14	22,94	22,28
C15	16,62	15,92
C16	15,36	14,72
C17	21,38	20,38
C18	22,06	20,72
C19	15,47	16,16
C20	22,27	23,89
C21	15,12	15,75
C22	19,60	17,59
C23	21,01	21,47
C24	15,98	16,34
C25	16,42	17,24
C26	16,21	17,31
C27	19,07	19,38
C28	23,61	22,92
C29	24,80	24,21
C30	20,66	21,21
C31	23,98	24,17
C32	16,80	16,86
C33	23,71	24,12
C34	19,34	19,73
C35	18,87	17,55
C36	20,53	19,17

Tabela B7 – Teor % de n-heptano – predição

Amostra	Referência	Raman
T01	19,64	18,76
T02	19,97	19,67
T03	19,51	19,03
T04	19,54	18,85
T05	19,60	19,39
T06	20,44	20,70
T07	22,57	22,95
T08	18,75	19,16
T09	18,51	19,06
T11	13,59	15,55
T12	20,43	20,59
T13	17,02	17,46
T14	23,82	23,23
T15	23,14	24,91
T16	24,17	24,94

Tabela B8 – Teor % de n-heptano – Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9434	0,06472
Validação	0,9466	0,08156
Predição	0,9216	0,2035

Tabela B9 – Teor % de isooctano – calibração

Amostra	Referência	Raman
C01	11,77	12,08
C02	8,91	8,99
C03	10,88	10,65
C04	7,35	7,33
C05	9,13	9,30
C06	7,97	8,10
C07	8,22	8,24
C08	10,68	10,62
C09	10,65	10,37
C10	11,66	11,41
C11	11,82	11,97
C12	8,82	8,48
C13	8,02	7,69
C14	8,41	8,71
C15	10,74	11,08
C16	9,01	9,14
C17	8,83	9,19
C18	9,38	9,50
C19	11,69	11,59
C20	10,83	10,65
C21	7,89	7,64
C22	8,31	8,65
C23	11,94	11,43
C24	8,45	8,55
C25	11,48	11,30
C26	7,81	7,75
C27	11,68	11,87
C28	11,03	11,35
C29	8,68	9,00
C30	11,17	11,03
C31	10,84	10,81
C32	10,83	10,52
C33	7,87	7,35
C34	10,79	10,95
C35	12,09	11,82
C36	8,21	8,75

Tabela B10 – Teor % de isooctano – validação

Amostra	Referência	Raman
C01	11,77	11,37
C02	8,91	9,26
C03	10,88	10,48
C04	7,35	8,09
C05	9,13	9,68
C06	7,97	8,23
C07	8,22	8,55
C08	10,68	10,68
C09	10,65	9,83
C10	11,66	10,84
C11	11,82	11,50
C12	8,82	8,47
C13	8,02	7,74
C14	8,41	9,21
C15	10,74	11,02
C16	9,01	9,08
C17	8,83	9,61
C18	9,38	9,87
C19	11,69	11,07
C20	10,83	9,97
C21	7,89	7,62
C22	8,31	9,51
C23	11,94	10,47
C24	8,45	8,90
C25	11,48	10,78
C26	7,81	7,92
C27	11,68	11,84
C28	11,03	11,59
C29	8,68	9,44
C30	11,17	10,85
C31	10,84	11,22
C32	10,83	9,44
C33	7,87	7,48
C34	10,79	10,73
C35	12,09	11,19
C36	8,21	9,30

Tabela B11 – Teor % de isooctano – predição

Amostra	Referência	Raman
T01	9,52	9,74
T02	9,84	9,60
T03	10,08	10,20
T04	9,66	9,87
T05	9,97	10,40
T06	8,85	9,02
T07	11,55	10,71
T08	9,52	9,43
T09	10,65	9,99
T11	9,27	7,82
T12	11,74	10,59
T13	8,71	8,12
T14	8,76	9,04
T15	10,54	9,96
T16	10,92	10,86

Tabela B12 – Teor % de isooctano – Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9693	0,4056
Validação	0,9780	0,6770
Predição	0,9205	0,1963

Tabela B13 – Teor % de cilo-hexano – calibração

Amostra	Referência	Raman
C01	9,95	10,02
C02	10,11	10,64
C03	6,25	6,66
C04	7,33	7,14
C05	5,94	5,77
C06	16,80	17,05
C07	24,84	23,97
C08	6,06	6,54
C09	1,14	0,36
C10	12,21	12,95
C11	6,63	6,56
C12	3,00	2,98
C13	19,76	19,12
C14	3,31	3,78
C15	5,01	5,18
C16	13,88	14,31
C17	2,02	1,54
C18	12,23	12,91
C19	12,07	12,25
C20	1,95	1,39
C21	19,40	18,82
C22	3,26	3,81
C23	8,01	8,26
C24	4,08	4,34
C25	15,57	15,29
C26	12,42	12,54
C27	8,10	8,43
C28	5,13	5,26
C29	8,15	8,15
C30	0,98	0,68
C31	1,03	0,41
C32	0,00	0,11
C33	1,01	0,88
C34	7,18	7,04
C35	16,34	16,87
C36	13,19	12,39

Tabela B14 – Teor % de cilo-hexano – validação

Amostra	Referência	Raman
C01	9,95	10,12
C02	10,11	11,05
C03	6,25	6,72
C04	7,33	7,60
C05	5,94	5,82
C06	16,80	17,21
C07	24,84	23,35
C08	6,06	6,82
C09	1,14	-0,08
C10	12,21	13,54
C11	6,63	6,47
C12	3,00	3,10
C13	19,76	18,63
C14	3,31	4,18
C15	5,01	5,31
C16	13,88	14,65
C17	2,02	1,31
C18	12,23	13,05
C19	12,07	12,30
C20	1,95	0,63
C21	19,40	18,67
C22	3,26	4,22
C23	8,01	8,32
C24	4,08	4,63
C25	15,57	14,96
C26	12,42	12,84
C27	8,10	8,69
C28	5,13	5,12
C29	8,15	7,98
C30	0,98	0,27
C31	1,03	-0,43
C32	0,00	0,03
C33	1,01	0,89
C34	7,18	6,97
C35	16,34	16,95
C36	13,19	11,96

Tabela B15 – Teor % de cilo-hexano – predição

Amostra	Referência	Raman
T01	9,76	10,34
T02	9,84	9,98
T03	9,73	10,41
T04	9,86	10,35
T05	9,71	10,20
T06	10,03	10,77
T07	7,07	6,54
T08	3,26	3,01
T09	5,07	5,24
T10	1,86	1,16
T11	19,30	17,94
T12	8,16	8,10
T13	4,10	3,55
T14	7,98	7,97
T15	0,99	0,30
T16	1,12	0,25

Tabela B16 – Teor % de cilo-hexano – Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9861	0,9225
Validação	0,9579	0,1849
Predição	0,8936	0,06348

Tabela B17 – Teor % de saturados - calibração

Amostra	Referência	Raman
C01	36,82	36,63
C02	39,04	39,05
C03	39,59	39,62
C04	36,31	36,27
C05	34,00	33,98
C06	39,78	39,96
C07	50,22	50,18
C08	37,32	37,33
C09	26,85	26,79
C10	40,60	40,60
C11	40,90	40,94
C12	32,47	32,44
C13	46,19	46,16
C14	34,65	34,78
C15	32,37	32,25
C16	38,26	38,29
C17	32,23	32,41
C18	43,67	43,66
C19	39,23	39,17
C20	35,05	35,01
C21	42,41	42,44
C22	31,18	31,18
C23	40,96	40,88
C24	28,51	28,47
C25	43,46	43,46
C26	36,44	36,52
C27	38,85	39,03
C28	39,78	39,74
C29	41,63	41,49
C30	32,81	32,79
C31	35,85	35,91
C32	27,62	27,65
C33	32,59	32,57
C34	37,31	37,33
C35	47,30	47,34
C36	41,94	41,85

Tabela B18 – Teor % de saturados - validação

Amostra	Referência	Raman
C01	36,82	37,15
C02	39,04	39,68
C03	39,59	39,00
C04	36,31	36,89
C05	34,00	34,49
C06	39,78	40,59
C07	50,22	49,10
C08	37,32	38,11
C09	26,85	25,77
C10	40,60	41,10
C11	40,90	40,61
C12	32,47	33,01
C13	46,19	45,70
C14	34,65	34,36
C15	32,37	31,55
C16	38,26	38,56
C17	32,23	32,61
C18	43,67	43,62
C19	39,23	39,07
C20	35,05	34,00
C21	42,41	42,60
C22	31,18	31,59
C23	40,96	40,38
C24	28,51	29,16
C25	43,46	43,04
C26	36,44	37,54
C27	38,85	40,04
C28	39,78	40,01
C29	41,63	41,28
C30	32,81	33,08
C31	35,85	36,29
C32	27,62	26,81
C33	32,59	31,62
C34	37,31	37,63
C35	47,30	46,66
C36	41,94	41,72

Tabela B19 – Teor % de saturados - predição

Amostra	Referência	Raman
T01	38,91	39,27
T02	39,65	39,78
T03	39,32	39,19
T04	39,05	39,40
T05	39,27	39,47
T06	39,32	40,63
T07	41,20	42,21
T08	31,52	32,89
T09	34,23	35,19
T10	32,35	33,89
T11	42,16	43,61
T12	40,33	41,47
T13	29,83	31,50
T14	40,56	42,16
T15	34,67	35,67
T16	36,21	37,42

Tabela B20 – Teor % de saturados - Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9444	0,06953
Validação	0,9564	0,1665
Predição	0,9052	0,09752

Tabela B21 – Teor % de ciclo-hexeno - calibração

Amostra	Referência	Raman
C01	21,12	21,40
C02	16,63	17,02
C03	23,52	23,57
C04	25,50	25,69
C05	22,54	22,28
C06	23,07	22,77
C07	15,09	15,65
C08	16,78	16,40
C09	24,79	24,88
C10	17,11	16,95
C11	23,76	24,17
C12	23,60	23,93
C13	18,46	18,23
C14	21,95	21,82
C15	23,06	23,42
C16	25,26	25,04
C17	24,31	24,30
C18	18,74	18,82
C19	18,44	18,74
C20	19,27	19,37
C21	20,69	20,75
C22	27,87	27,66
C23	27,84	27,65
C24	25,91	25,97
C25	21,19	20,95
C26	23,74	23,44
C27	19,00	18,53
C28	25,53	25,63
C29	21,30	21,54
C30	25,00	25,09
C31	21,24	20,72
C32	27,18	27,08
C33	26,29	26,47
C34	27,84	27,77
C35	16,89	16,58
C36	19,02	19,30

Tabela B22 – Teor % de ciclo-hexeno - validação

Amostra	Referência	Raman
C01	21,12	21,66
C02	16,63	17,47
C03	23,52	23,65
C04	25,50	25,90
C05	22,54	22,70
C06	23,07	22,10
C07	15,09	16,44
C08	16,78	16,52
C09	24,79	25,64
C10	17,11	16,83
C11	23,76	24,17
C12	23,60	24,33
C13	18,46	18,12
C14	21,95	21,09
C15	23,06	23,33
C16	25,26	24,87
C17	24,31	24,52
C18	18,74	18,88
C19	18,44	18,90
C20	19,27	19,04
C21	20,69	21,02
C22	27,87	26,99
C23	27,84	27,33
C24	25,91	26,03
C25	21,19	20,58
C26	23,74	23,25
C27	19,00	18,50
C28	25,53	25,17
C29	21,30	21,37
C30	25,00	25,30
C31	21,24	20,64
C32	27,18	26,92
C33	26,29	26,85
C34	27,84	27,60
C35	16,89	16,33
C36	19,02	19,54

Tabela B23 – Teor % de ciclo-hexeno - predição

Amostra	Referência	Raman
T01	22,07	21,70
T02	22,06	21,55
T03	22,04	22,30
T04	22,52	21,82
T05	21,82	22,11
T06	16,97	17,86
T07	23,51	23,55
T08	24,25	24,62
T09	23,23	23,71
T10	24,21	24,15
T11	20,93	20,89
T12	27,64	26,52
T13	26,43	26,61
T14	20,92	20,96
T15	24,40	25,28
T16	21,14	21,91

Tabela B24 – Teor % de ciclo-hexeno - Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9575	0,1795
Validação	0,9446	0,07083
Predição	0,9490	0,4737

Tabela B25 – Teor % de benzeno - calibração

Amostra	Referência	Raman
C01	1,128	1,121
C02	2,323	2,309
C03	0,000	-0,108
C04	0,000	-0,042
C05	2,303	2,439
C06	2,197	2,077
C07	1,158	1,188
C08	1,125	1,090
C09	2,240	2,270
C10	2,250	2,204
C11	1,137	1,117
C12	0,000	-0,004
C13	2,239	2,162
C14	2,374	2,338
C15	1,138	1,105
C16	0,000	0,000
C17	1,114	0,993
C18	0,000	0,132
C19	1,155	1,070
C20	2,273	2,355
C21	0,000	0,161
C22	1,137	1,238
C23	0,000	0,031
C24	1,092	1,044
C25	1,195	1,121
C26	2,314	2,367
C27	0,000	-0,059
C28	1,084	1,202
C29	1,018	1,042
C30	2,261	2,297
C31	0,000	-0,108
C32	0,000	0,104
C33	2,358	2,415
C34	2,090	1,954
C35	0,000	0,086
C36	0,931	0,922

Tabela B26 – Teor % de benzeno – validação

Amostra	Referência	Raman
C01	1,128	1,003
C02	2,323	2,286
C03	0,000	-0,148
C04	0,000	-0,004
C05	2,303	2,502
C06	2,197	1,946
C07	1,158	1,175
C08	1,125	1,057
C09	2,240	2,387
C10	2,250	2,132
C11	1,137	1,192
C12	0,000	0,006
C13	2,239	1,946
C14	2,374	2,301
C15	1,138	1,147
C16	0,000	0,074
C17	1,114	0,876
C18	0,000	0,310
C19	1,155	1,080
C20	2,273	2,440
C21	0,000	0,405
C22	1,137	1,252
C23	0,000	0,067
C24	1,092	1,037
C25	1,195	1,089
C26	2,314	2,395
C27	0,000	0,008
C28	1,084	1,260
C29	1,018	1,029
C30	2,261	2,192
C31	0,000	-0,175
C32	0,000	0,245
C33	2,358	2,416
C34	2,090	1,816
C35	0,000	0,179
C36	0,932	0,896

Tabela B27 – Teor % de benzeno – predição

Amostra	Referência	Raman
T01	1,301	1,208
T02	1,027	1,105
T03	1,374	1,239
T04	1,120	1,014
T05	1,198	1,074
T06	2,337	2,076
T07	1,148	1,034
T08	0,000	-0,036
T09	1,151	0,934
T10	1,166	0,957
T11	0,000	0,304
T12	0,000	0,043
T13	1,092	1,249
T14	1,175	1,015
T15	2,262	2,198
T16	0,000	-0,013

Tabela B28 – Teor % de benzeno - Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9730	0,5117
Validação	0,9834	0,8534
Predição	0,9331	0,2729

Tabela B29 – Teor % de tolueno – calibração

Amostra	Referência	Raman
C01	3,34	3,42
C02	6,80	6,84
C03	2,19	2,19
C04	3,03	3,07
C05	2,23	2,06
C06	6,71	6,35
C07	2,27	2,62
C08	5,66	5,90
C09	6,67	6,87
C10	3,37	3,20
C11	3,42	3,53
C12	5,71	5,68
C13	2,18	2,32
C14	3,52	3,49
C15	6,78	6,74
C16	2,23	2,13
C17	5,65	5,71
C18	6,75	6,57
C19	5,61	5,52
C20	5,62	5,81
C21	2,24	2,15
C22	3,44	3,44
C23	2,25	2,42
C24	6,45	6,56
C25	5,67	5,55
C26	6,27	6,17
C27	3,26	3,08
C28	2,39	2,32
C29	6,54	6,64
C30	3,32	3,12
C31	5,63	5,62
C32	6,83	6,77
C33	4,27	4,15
C34	2,59	2,80
C35	5,27	5,35
C36	3,36	3,33

Tabela B30 – Teor % de tolueno – validação

Amostra	Referência	Raman
C01	3,34	3,51
C02	6,80	6,87
C03	2,19	2,25
C04	3,03	2,99
C05	2,23	1,81
C06	6,71	5,86
C07	2,27	3,19
C08	5,66	5,93
C09	6,67	7,06
C10	3,37	3,27
C11	3,42	3,61
C12	5,71	5,78
C13	2,18	2,90
C14	3,52	3,37
C15	6,78	6,63
C16	2,23	2,16
C17	5,65	5,38
C18	6,75	5,90
C19	5,61	5,38
C20	5,62	6,11
C21	2,24	2,32
C22	3,44	3,69
C23	2,25	2,55
C24	6,45	6,76
C25	5,67	5,13
C26	6,27	6,02
C27	3,26	3,09
C28	2,39	2,71
C29	6,54	6,34
C30	3,32	3,46
C31	5,63	5,74
C32	6,83	6,65
C33	4,27	4,04
C34	2,59	2,95
C35	5,27	5,18
C36	3,36	3,38

Tabela B31 – Teor % de tolueno – predição

Amostra	Referência	Raman
T01	4,52	4,67
T02	4,57	4,33
T03	4,49	4,35
T04	4,31	4,50
T05	4,54	4,53
T06	6,73	6,48
T07	3,50	3,51
T08	6,02	5,95
T09	6,85	6,53
T10	5,66	5,53
T11	2,19	2,43
T12	3,43	3,43
T13	2,37	2,20
T14	6,69	6,30
T15	3,46	3,31
T16	5,69	5,43

Tabela B32 – Teor % de tolueno - Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9826	0,9513
Validação	0,9716	0,4720
Predição	0,9623	0,7043

Tabela B33 – Teor % de p-xileno – calibração

Amostra	Referência	Raman
C01	2,37	2,15
C02	3,40	3,40
C03	4,26	4,47
C04	2,07	2,05
C05	4,37	4,40
C06	2,25	2,42
C07	4,64	4,50
C08	4,37	4,54
C09	4,41	4,08
C10	3,32	3,03
C11	2,19	1,94
C12	2,34	2,38
C13	2,22	2,42
C14	2,32	2,22
C15	3,32	3,24
C16	2,19	2,16
C17	3,35	3,51
C18	4,44	4,32
C19	4,51	4,63
C20	2,23	2,25
C21	3,21	3,18
C22	4,52	4,52
C23	4,55	4,45
C24	3,24	3,21
C25	1,12	1,47
C26	3,19	3,10
C27	4,57	4,58
C28	2,24	2,18
C29	2,27	2,40
C30	3,48	3,55
C31	3,33	3,54
C32	2,25	2,23
C33	3,35	3,41
C34	3,42	3,44
C35	3,38	3,16
C36	3,40	3,55

Tabela B34 – Teor % de p-xileno – validação

Amostra	Referência	Raman
C01	2,37	2,21
C02	3,40	3,27
C03	4,26	4,57
C04	2,07	2,27
C05	4,37	4,52
C06	2,25	2,77
C07	4,64	3,80
C08	4,37	4,47
C09	4,41	3,60
C10	3,32	2,85
C11	2,19	2,12
C12	2,34	2,33
C13	2,22	2,82
C14	2,32	2,36
C15	3,32	3,43
C16	2,19	2,55
C17	3,35	3,66
C18	4,44	3,60
C19	4,51	4,57
C20	2,23	2,21
C21	3,21	3,17
C22	4,52	3,71
C23	4,55	3,91
C24	3,24	3,14
C25	1,12	2,58
C26	3,19	2,91
C27	4,57	4,54
C28	2,24	2,40
C29	2,27	2,52
C30	3,48	3,74
C31	3,33	3,80
C32	2,25	2,31
C33	3,35	3,19
C34	3,42	3,43
C35	3,38	2,86
C36	3,40	3,53

Tabela B35 – Teor % de p-xileno – predição

Amostra	Referência	Raman
T01	3,38	3,43
T02	3,36	3,20
T03	3,33	3,18
T04	3,38	3,35
T05	3,39	3,22
T06	3,42	3,60
T07	2,23	2,43
T08	2,37	2,86
T09	3,35	3,67
T10	3,31	3,55
T11	3,37	3,27
T12	4,43	4,17
T13	3,36	3,41
T14	2,23	2,76
T15	3,46	3,71
T16	3,39	3,86

Tabela B36 – Teor % de p-xileno - Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9825	0,8270
Validação	0,9230	0,01543
Predição	0,9424	0,3788

Tabela B37 – Teor % de m-xileno – calibração

Amostra	Referência	Raman
C01	2,10	1,91
C02	4,54	4,72
C03	3,34	3,23
C04	1,98	2,04
C05	2,29	2,12
C06	4,39	4,34
C07	4,48	4,34
C08	2,33	2,46
C09	3,24	3,30
C10	3,25	3,58
C11	3,48	3,43
C12	3,36	3,43
C13	4,37	4,44
C14	2,36	2,43
C15	4,44	4,20
C16	3,22	3,24
C17	2,24	2,24
C18	2,25	2,51
C19	4,30	4,21
C20	3,39	3,32
C21	3,38	3,42
C22	3,37	3,20
C23	2,29	2,29
C24	4,18	4,27
C25	2,29	2,33
C26	4,27	4,19
C27	4,42	4,39
C28	4,54	4,52
C29	3,45	3,39
C30	4,68	4,61
C31	4,55	4,52
C32	4,49	4,58
C33	3,39	3,55
C34	2,30	2,25
C35	3,39	3,31
C36	3,39	3,42

Tabela B38 – Teor % de m-xileno – validação

Amostra	Referência	Raman
C01	2,10	1,74
C02	4,54	4,83
C03	3,34	3,22
C04	1,98	2,32
C05	2,29	2,16
C06	4,39	4,15
C07	4,48	4,00
C08	2,33	2,62
C09	3,24	3,07
C10	3,25	3,91
C11	3,48	3,21
C12	3,36	3,38
C13	4,37	4,36
C14	2,36	2,35
C15	4,44	3,95
C16	3,22	3,37
C17	2,24	2,59
C18	2,25	2,63
C19	4,30	4,16
C20	3,39	3,37
C21	3,38	3,55
C22	3,37	2,98
C23	2,29	2,74
C24	4,18	4,26
C25	2,29	2,16
C26	4,27	3,96
C27	4,42	4,79
C28	4,54	4,18
C29	3,45	3,26
C30	4,68	4,03
C31	4,55	4,27
C32	4,49	4,65
C33	3,39	3,88
C34	2,30	2,39
C35	3,39	3,13
C36	3,39	3,51

Tabela B39 – Teor % de m-xileno – predição

Amostra	Referência	Raman
T01	3,43	3,20
T02	3,26	3,57
T03	3,33	3,66
T04	3,39	3,21
T05	3,37	3,65
T06	4,49	4,69
T07	3,34	3,44
T08	4,67	4,92
T09	2,16	2,18
T10	2,25	2,66
T11	3,39	3,36
T12	2,32	2,34
T13	4,45	4,45
T14	3,39	3,56
T15	4,57	4,76
T16	4,53	4,52

Tabela B40 – Teor % de m-xileno – Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9764	0,6220
Validação	0,9831	0,8438
Predição	0,9644	0,7424

Tabela B41 – Teor % de o-xileno - calibração

Amostra	Referência	Raman
C01	3,38	3,41
C02	3,40	3,34
C03	3,40	3,57
C04	4,09	3,98
C05	2,25	2,24
C06	2,22	2,34
C07	2,31	2,42
C08	4,51	4,72
C09	4,47	4,47
C10	4,47	4,57
C11	3,44	3,42
C12	4,53	4,56
C13	3,35	3,37
C14	3,51	3,40
C15	3,35	3,42
C16	3,37	3,40
C17	2,27	2,09
C18	4,54	4,49
C19	3,34	3,21
C20	2,26	2,21
C21	4,45	4,33
C22	4,58	4,55
C23	2,23	2,36
C24	4,26	4,25
C25	5,15	4,99
C26	3,28	3,05
C27	2,12	2,19
C28	4,66	4,67
C29	2,33	2,40
C30	4,70	4,81
C31	3,44	3,53
C32	2,18	2,19
C33	3,33	3,21
C34	2,29	2,26
C35	2,39	2,41
C36	2,16	2,16

Tabela B42 – Teor % de o-xileno – validação

Amostra	Referência	Raman
C01	3,38	3,35
C02	3,40	3,36
C03	3,40	3,86
C04	4,09	4,03
C05	2,25	2,48
C06	2,22	2,54
C07	2,31	2,80
C08	4,51	4,84
C09	4,47	4,85
C10	4,47	4,38
C11	3,44	3,48
C12	4,53	4,70
C13	3,35	3,32
C14	3,51	3,75
C15	3,35	3,29
C16	3,37	3,45
C17	2,27	1,77
C18	4,54	4,38
C19	3,34	2,92
C20	2,26	2,15
C21	4,45	4,11
C22	4,58	4,22
C23	2,23	2,50
C24	4,26	3,93
C25	5,15	4,57
C26	3,28	2,96
C27	2,12	2,40
C28	4,66	3,96
C29	2,33	2,77
C30	4,70	4,82
C31	3,44	3,67
C32	2,18	2,54
C33	3,33	3,19
C34	2,29	2,36
C35	2,39	2,58
C36	2,16	2,41

Tabela B43 – Teor % de o-xileno – predição

Amostra	Referência	Raman
T01	3,44	3,22
T02	3,80	3,46
T03	3,73	3,94
T04	3,31	3,05
T05	3,40	3,66
T06	3,40	3,81
T07	3,50	3,95
T08	2,43	3,18
T09	3,45	3,75
T10	2,30	2,65
T11	4,58	4,32
T12	2,23	2,60
T13	4,68	4,99
T14	2,30	2,50
T15	4,58	4,98
T16	3,39	3,97

Tabela B44 – Teor % de o-xileno - Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9760	0,6107
Validação	0,9741	0,5474
Predição	0,9618	0,6945

Tabela B45 – Teor % de aromático – calibração

Amostra	Referência	Raman
C01	12,31	12,04
C02	20,46	20,56
C03	13,20	13,24
C04	11,17	11,21
C05	13,45	13,34
C06	17,77	17,69
C07	14,87	14,76
C08	17,99	18,05
C09	21,03	21,03
C10	16,66	16,45
C11	13,66	13,54
C12	15,93	15,96
C13	14,36	14,47
C14	14,08	14,02
C15	19,02	19,11
C16	11,00	11,09
C17	14,62	14,55
C18	17,97	17,80
C19	18,90	18,78
C20	15,77	15,86
C21	13,27	13,36
C22	17,04	17,00
C23	11,32	11,40
C24	19,21	19,26
C25	15,43	15,44
C26	19,32	19,36
C27	14,36	14,42
C28	14,92	14,77
C29	15,60	15,76
C30	18,43	18,29
C31	16,94	17,05
C32	15,74	15,71
C33	16,70	16,84
C34	12,69	12,68
C35	14,43	14,51
C36	13,23	13,48

Tabela B46 – Teor % de aromático – validação

Amostra	Referência	Raman
C01	12,31	12,22
C02	20,46	20,23
C03	13,20	12,93
C04	11,17	11,16
C05	13,45	13,44
C06	17,77	17,28
C07	14,87	14,42
C08	17,99	18,29
C09	21,03	21,37
C10	16,66	16,03
C11	13,66	13,60
C12	15,93	15,36
C13	14,36	15,05
C14	14,08	14,77
C15	19,02	18,99
C16	11,00	11,65
C17	14,62	14,42
C18	17,97	16,91
C19	18,90	17,86
C20	15,77	16,41
C21	13,27	13,38
C22	17,04	16,75
C23	11,32	11,88
C24	19,21	18,81
C25	15,43	16,32
C26	19,32	18,97
C27	14,36	13,97
C28	14,92	14,35
C29	15,60	15,97
C30	18,43	17,78
C31	16,94	17,33
C32	15,74	16,63
C33	16,70	16,49
C34	12,69	13,14
C35	14,43	15,25
C36	13,23	13,79

Tabela B47 – Teor % de aromático – predição

Amostra	Referência	Raman
T01	16,06	16,16
T02	16,02	15,88
T03	16,25	16,20
T04	15,51	15,42
T05	15,90	15,95
T06	20,37	18,62
T07	13,72	12,76
T08	15,49	14,91
T09	16,96	15,70
T10	14,69	13,83
T11	13,53	12,72
T12	12,41	11,97
T13	15,93	14,48
T14	15,77	14,83
T15	18,32	16,74
T16	17,00	15,25

Tabela B48 – Teor % de aromático – Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9699	0,4220
Validação	0,9595	0,2040
Predição	0,9242	0,1968

Apêndice C

Tabelas de valores de referência (IROX) e Raman para as propriedades estudadas nas gasolinas comerciais

Tabela C1 – Teor % de saturados – calibração

Amostra	IROX	Raman
g1081	43,3	43,9
g1083	44,2	44,4
g1085	43,3	43,6
g1090	43,5	44,6
g1095	39,9	40,5
g1096	45,1	44,8
g1294	48,3	47,5
g1302	43,5	43,4
g1315	43,0	43,8
g1322	44,6	44,2
g1328	45,3	46,4
g1335	41,7	41,8
g1342	42,5	42,2
g1493	41,9	42,5
g1495	42,6	42,3
g1504	42,3	43,3
g1506	41,8	41,9
g1507	43,0	42,8
g1510	43,8	43,5
g1513	42,9	42,6
g1633	47,0	45,5
g1637	42,9	41,5
g1640	44,4	44,9
g1643	44,2	42,9
g1644	42,9	43,4
g1647	42,8	41,9
g1650	40,3	42,3
g1654	43,9	42,1
g1657	44,1	44,1
g1677	38,1	39,2
g1698	39,6	40,5
g1728	47,8	47,3
g1731	41,6	41,4
g1734	38,8	39,2
g1736	43,2	44,4
g1740	47,9	48,1
g1742	46,2	45,5
g1746	40,0	40,2
g1748	42,2	41,9
g1749	42,6	42,4
g1750	43,3	43,4
g1758	41,4	41,8
g3165	34,0	35,1
g3171	38,9	38,1
g3178	35,2	35,9
g3184	38,5	36,9
g3187	35,6	36,1
g3190	40,4	38,4

Tabela C2 – Teor % de saturados – validação

Amostra	IROX	Raman
g1081	43,3	44,0
g1083	44,2	43,9
g1085	43,3	43,9
g1090	43,5	44,3
g1095	39,9	44,5
g1096	45,1	42,8
g1294	48,3	41,7
g1302	43,5	42,4
g1315	43,0	42,9
g1322	44,6	41,6
g1328	45,3	44,5
g1335	41,7	42,5
g1342	42,5	42,3
g1493	41,9	42,7
g1495	42,6	39,9
g1504	42,3	42,4
g1506	41,8	42,1
g1507	43,0	41,8
g1510	43,8	47,3
g1513	42,9	42,7
g1633	47,0	44,5
g1637	42,9	41,0
g1640	44,4	45,3
g1643	44,2	42,3
g1644	42,9	43,8
g1647	42,8	41,8
g1650	40,3	43,4
g1654	43,9	41,0
g1657	44,1	44,5
g1677	38,1	41,0
g1698	39,6	41,5
g1728	47,8	42,9
g1731	41,6	40,7
g1734	38,8	41,0
g1736	43,2	46,4
g1740	47,9	46,6
g1742	46,2	39,5
g1746	40,0	41,2
g1748	42,2	40,8
g1749	42,6	41,9
g1750	43,3	42,2
g1758	41,4	42,4
g3165	34,0	37,9
g3171	38,9	40,9
g3178	35,2	38,7
g3184	38,5	37,1
g3187	35,6	37,8
g3190	40,4	37,1

Tabela C3 – Teor % de saturados – predição

Amostra	IROX	Raman
g1086	46,8	43,6
g1091	42,8	44,4
g1098	43,7	41,7
g1298	43,4	43,9
g1305	38,4	39,4
g1338	41,4	43,6
g1497	39,9	42,0
g1508	43,6	42,7
g1634	44,7	43,9
g1651	45,8	42,8
g1660	43,9	42,0
g1709	38,6	41,4
g1738	40,6	41,5
g1744	44,0	46,2
g1753	36,6	41,3
g1761	40,2	41,3
g3168	32,7	39,2
g3174	35,9	38,1
g3182	35,2	37,9
g3185	37,8	39,7

Tabela C4 – Teor % de saturados – Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9749	0,3892
Validação	0,9713	0,2839
Predição	0,9559	0,4656

Tabela C5 – Teor % de benzeno – calibração

Amostra	IROX	Raman
g1081	0,20	0,19
g1083	0,23	0,23
g1085	0,20	0,20
g1090	0,19	0,19
g1095	0,23	0,23
g1096	0,21	0,21
g1294	0,27	0,26
g1302	0,27	0,28
g1315	0,28	0,28
g1322	0,31	0,31
g1328	0,26	0,27
g1335	0,29	0,30
g1342	0,25	0,26
g1493	0,30	0,31
g1495	0,30	0,31
g1504	0,29	0,29
g1506	0,30	0,30
g1507	0,31	0,31
g1510	0,29	0,30
g1513	0,22	0,21
g1633	0,20	0,23
g1637	0,37	0,36
g1640	0,20	0,19
g1643	0,33	0,34
g1644	0,28	0,27
g1647	0,36	0,35
g1650	0,33	0,33
g1654	0,40	0,37
g1657	0,27	0,26
g1677	0,37	0,40
g1698	0,37	0,37
g1728	0,29	0,30
g1731	0,40	0,41
g1734	0,37	0,39
g1736	0,50	0,48
g1740	0,27	0,25
g1742	0,49	0,50
g1746	0,37	0,38
g1748	0,38	0,38
g1749	0,42	0,41
g1750	0,38	0,38
g1758	0,33	0,35
g3165	0,28	0,30
g3171	0,45	0,39
g3178	0,31	0,28
g3184	0,29	0,31
g3187	0,33	0,33
g3190	0,28	0,28

Tabela C6 – Teor % de benzeno – validação

Amostra	IROX	Raman
g1081	0,20	0,21
g1083	0,23	0,26
g1085	0,20	0,23
g1090	0,19	0,22
g1095	0,23	0,22
g1096	0,21	0,26
g1294	0,27	0,26
g1302	0,27	0,29
g1315	0,28	0,27
g1322	0,31	0,31
g1328	0,26	0,28
g1335	0,29	0,29
g1342	0,25	0,28
g1493	0,30	0,31
g1495	0,30	0,29
g1504	0,29	0,32
g1506	0,30	0,29
g1507	0,31	0,29
g1510	0,29	0,35
g1513	0,22	0,22
g1633	0,20	0,26
g1637	0,37	0,36
g1640	0,20	0,18
g1643	0,33	0,33
g1644	0,28	0,27
g1647	0,36	0,35
g1650	0,33	0,32
g1654	0,40	0,35
g1657	0,27	0,27
g1677	0,37	0,41
g1698	0,37	0,37
g1728	0,29	0,32
g1731	0,40	0,39
g1734	0,37	0,39
g1736	0,50	0,45
g1740	0,27	0,24
g1742	0,49	0,54
g1746	0,37	0,37
g1748	0,38	0,37
g1749	0,42	0,38
g1750	0,38	0,34
g1758	0,33	0,37
g3165	0,28	0,31
g3171	0,45	0,32
g3178	0,31	0,27
g3184	0,29	0,35
g3187	0,33	0,33
g3190	0,28	0,29

Tabela C7 – Teor % de benzeno – predição

Amostra	IROX	Raman
g1086	0,25	0,26
g1091	0,21	0,25
g1098	0,24	0,24
g1298	0,25	0,27
g1305	0,29	0,34
g1338	0,34	0,32
g1497	0,28	0,25
g1508	0,24	0,31
g1634	0,28	0,28
g1651	0,27	0,29
g1660	0,35	0,35
g1709	0,30	0,38
g1738	0,40	0,39
g1744	0,35	0,45
g1753	0,38	0,38
g1761	0,37	0,39
g3168	0,29	0,31
g3174	0,27	0,31
g3182	0,31	0,29
g3185	0,28	0,37

Tabela C8 – Teor % de benzeno – Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,8963	0,0004778(*)
Validação	0,9168	0,002305(*)
Predição	0,9317	0,1667

(*) normalidade rejeitada

Tabela C9 – Teor % de aromáticos - calibração

Amostras	IROX	Raman
g1081	12,4	12,5
g1083	13,1	13,1
g1085	13,9	13,6
g1090	13,2	12,6
g1095	14,3	13,8
g1096	12,9	13,3
g1294	12,9	12,9
g1302	13,6	13,7
g1315	13,7	13,9
g1322	14,3	14,2
g1328	13,2	14,0
g1335	14,2	14,7
g1342	13,5	14,0
g1493	14,2	14,5
g1495	14,9	14,4
g1504	13,4	13,5
g1506	14,3	14,4
g1507	13,4	13,9
g1510	18,5	18,6
g1513	12,5	11,8
g1633	11,4	12,4
g1637	15,4	15,1
g1640	12,7	12,1
g1643	15,5	15,1
g1644	14,1	13,6
g1647	16,0	15,3
g1650	15,6	15,3
g1654	15,5	15,4
g1657	11,9	12,6
g1677	16,4	16,3
g1698	16,3	16,0
g1728	13,9	14,7
g1731	17,2	17,5
g1734	15,5	15,9
g1736	19,9	19,8
g1740	13,4	13,3
g1742	20,5	20,5
g1746	16,1	16,4
g1748	15,8	16,0
g1749	16,1	16,3
g1750	15,6	16,1
g1758	16,2	15,2
g3165	13,0	13,0
g3171	14,3	13,7
g3178	13,8	12,0
g3184	13,1	13,1
g3187	13,6	13,5
g3190	9,5	11,4

Tabela C10 – Teor % de aromáticos - validação

Amostra	IROX	Raman
g1081	12,4	12,9
g1083	13,1	13,2
g1085	13,9	13,3
g1090	13,2	12,5
g1095	14,3	13,4
g1096	12,9	13,6
g1294	12,9	13,2
g1302	13,6	13,9
g1315	13,7	14,0
g1322	14,3	14,2
g1328	13,2	14,3
g1335	14,2	14,6
g1342	13,5	14,1
g1493	14,2	14,5
g1495	14,9	13,6
g1504	13,4	13,8
g1506	14,3	14,3
g1507	13,4	14,1
g1510	18,5	19,2
g1513	12,5	11,7
g1633	11,4	12,7
g1637	15,4	15,0
g1640	12,7	11,9
g1643	15,5	15,0
g1644	14,1	13,4
g1647	16,0	15,0
g1650	15,6	15,2
g1654	15,5	15,5
g1657	11,9	13,0
g1677	16,4	16,2
g1698	16,3	15,9
g1728	13,9	14,9
g1731	17,2	17,3
g1734	15,5	15,9
g1736	19,9	19,6
g1740	13,4	13,4
g1742	20,5	20,6
g1746	16,1	16,1
g1748	15,8	15,8
g1749	16,1	16,1
g1750	15,6	15,8
g1758	16,2	14,8
g3165	13,0	13,2
g3171	14,3	13,6
g3178	13,8	11,4
g3184	13,1	13,6
g3187	13,6	13,6
g3190	9,5	12,8

Tabela C11 – Teor % de aromáticos - predição

Amostra	IROX	Raman
g1086	13,8	13,4
g1091	13,2	13,6
g1098	13,3	12,6
g1298	14,0	13,8
g1305	15,3	15,7
g1338	14,3	15,2
g1497	13,7	13,0
g1508	13,8	13,9
g1634	13,7	13,8
g1651	14,1	13,7
g1660	15,2	15,4
g1709	15,5	15,5
g1738	15,7	16,3
g1744	20,2	20,8
g1753	16,1	16,0
g1761	16,0	16,0
g3168	14,3	14,0
g3174	14,4	13,4
g3182	13,3	12,6
g3185	13,8	13,8

Tabela C12 – Teor % de aromáticos - Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9546	0,06134
Validação	0,9263	0,0004983(*)
Predição	0,9789	0,9193

(*) normalidade rejeitada

Tabela C13 – Teor % de olefinas – calibração

Amostra	IROX	Raman
g1081	22,3	22,2
g1083	20,2	20,2
g1085	20,1	20,0
g1090	20,0	20,2
g1095	22,2	22,7
g1096	19,0	18,8
g1294	16,3	15,8
g1302	19,4	19,3
g1315	20,0	19,7
g1322	18,4	18,1
g1328	19,0	18,6
g1335	21,3	21,4
g1342	20,9	21,1
g1493	21,8	21,3
g1495	21,0	20,8
g1504	21,0	20,8
g1506	21,1	21,2
g1507	20,5	20,8
g1510	13,9	14,3
g1513	21,7	21,4
g1633	19,6	19,6
g1637	19,1	19,6
g1640	19,9	20,2
g1643	17,3	18,7
g1644	20,3	20,2
g1647	18,4	19,3
g1650	21,5	20,1
g1654	18,1	19,3
g1657	21,3	20,2
g1677	21,9	20,7
g1698	20,9	20,3
g1728	16,6	16,6
g1731	18,9	19,4
g1734	23,1	23,4
g1736	14,3	13,8
g1740	16,8	17,3
g1742	8,9	8,7
g1746	21,3	21,8
g1748	19,5	19,6
g1749	19,2	19,3
g1750	18,4	18,6
g1758	19,6	19,8
g3165	27,5	26,9
g3171	21,2	21,1
g3178	25,3	25,4
g3184	23,1	23,7
g3187	25,3	24,9
g3190	24,7	25,1

Tabela C14 – Teor % de olefinas – validação

Amostra	IROX	Raman
g1081	22,3	20,1
g1083	20,2	19,9
g1085	20,1	20,3
g1090	20,0	21,0
g1095	22,2	19,9
g1096	19,0	20,5
g1294	16,3	21,0
g1302	19,4	20,5
g1315	20,0	20,6
g1322	18,4	20,8
g1328	19,0	19,0
g1335	21,3	20,3
g1342	20,9	20,8
g1493	21,8	20,2
g1495	21,0	23,2
g1504	21,0	21,3
g1506	21,1	21,2
g1507	20,5	21,7
g1510	13,9	11,8
g1513	21,7	22,0
g1633	19,6	19,5
g1637	19,1	20,3
g1640	19,9	20,8
g1643	17,3	20,2
g1644	20,3	20,0
g1647	18,4	20,2
g1650	21,5	19,0
g1654	18,1	20,6
g1657	21,3	18,9
g1677	21,9	19,2
g1698	20,9	19,8
g1728	16,6	19,9
g1731	18,9	19,7
g1734	23,1	20,1
g1736	14,3	11,1
g1740	16,8	18,4
g1742	8,9	14,8
g1746	21,3	20,7
g1748	19,5	20,5
g1749	19,2	19,4
g1750	18,4	20,2
g1758	19,6	19,7
g3165	27,5	24,1
g3171	21,2	20,7
g3178	25,3	24,5
g3184	23,1	23,4
g3187	25,3	23,4
g3190	24,7	24,7

Tabela C15 – Teor % de olefinas – predição

Amostra	IROX	Raman
g1086	16,6	20,7
g1091	20,8	19,8
g1098	19,9	21,9
g1298	19,4	19,9
g1305	23,1	22,0
g1338	21,6	18,3
g1497	23,0	22,8
g1508	19,6	20,9
g1634	18,8	19,8
g1651	17,2	20,5
g1660	18,1	19,9
g1709	22,6	19,7
g1738	21,4	19,8
g1744	12,6	10,6
g1753	24,3	20,1
g1761	21,1	20,0
g3168	27,8	23,2
g3174	24,2	24,2
g3182	25,8	24,6
g3185	23,1	21,1

Tabela C16 – Teor % de olefinas – Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9696	0,2449
Validação	0,9715	0,2907
Predição	0,9817	0,9540

Tabela C17 – Número de octanos motor (MON) – calibração

Amostra	IROX	Raman
g1081	81,9	81,8
g1083	82,7	82,7
g1085	82,3	82,2
g1090	82,3	82,3
g1095	82,6	82,6
g1096	82,8	82,8
g1294	82,6	82,7
g1302	82,7	82,7
g1315	82,9	82,9
g1322	83,3	83,4
g1328	82,8	82,7
g1335	83,0	83,1
g1342	82,8	82,8
g1493	82,8	82,7
g1495	83,3	83,3
g1504	83,0	82,9
g1506	83,0	82,9
g1507	83,3	83,3
g1510	81,4	81,6
g1513	82,8	82,8
g1633	82,2	82,3
g1637	83,6	83,4
g1640	82,4	82,3
g1643	83,5	83,3
g1644	82,9	82,8
g1647	82,0	82,6
g1650	83,2	83,1
g1654	82,6	82,8
g1657	82,6	82,5
g1677	83,5	83,5
g1698	83,4	83,3
g1728	83,0	83,0
g1731	83,2	83,1
g1734	83,4	83,4
g1736	81,8	81,6
g1740	82,5	82,4
g1742	81,7	81,6
g1746	83,5	83,5
g1748	83,7	83,7
g1749	84,0	84,1
g1750	83,8	83,9
g1758	83,4	83,4
g3165	81,6	81,9
g3171	82,1	82,2
g3178	82,1	82,1
g3184	81,8	81,8
g3187	81,9	81,9
g3190	81,8	81,7

Tabela C18 – Número de octanos motor (MON) – validação

Amostra	IROX	Raman
g1081	81,9	82,5
g1083	82,7	82,7
g1085	82,3	82,6
g1090	82,3	82,4
g1095	82,6	82,6
g1096	82,8	82,7
g1294	82,6	82,5
g1302	82,7	82,5
g1315	82,9	82,8
g1322	83,3	82,9
g1328	82,8	82,7
g1335	83,0	83,2
g1342	82,8	82,6
g1493	82,8	83,0
g1495	83,3	83,3
g1504	83,0	83,1
g1506	83,0	83,2
g1507	83,3	82,9
g1510	81,4	81,1
g1513	82,8	82,4
g1633	82,2	82,5
g1637	83,6	83,0
g1640	82,4	82,2
g1643	83,5	83,1
g1644	82,9	82,6
g1647	82,0	83,3
g1650	83,2	83,1
g1654	82,6	83,2
g1657	82,6	82,3
g1677	83,5	83,4
g1698	83,4	83,3
g1728	83,0	83,1
g1731	83,2	82,6
g1734	83,4	83,2
g1736	81,8	82,3
g1740	82,5	82,4
g1742	81,7	81,4
g1746	83,5	83,6
g1748	83,7	83,3
g1749	84,0	83,6
g1750	83,8	83,4
g1758	83,4	83,0
g3165	81,6	82,5
g3171	82,1	82,4
g3178	82,1	81,7
g3184	81,8	82,4
g3187	81,9	82,3
g3190	81,8	81,7

Tabela C19 – Número de octanos motor (MON) – predição

Amostra	IROX	Raman
g1086	82,3	82,5
g1091	82,5	82,7
g1098	82,5	82,1
g1298	82,7	82,8
g1305	83,3	83,1
g1338	82,4	82,7
g1497	83,2	82,7
g1508	82,8	83,1
g1634	82,5	82,7
g1651	82,8	82,8
g1660	83,5	83,1
g1709	83,1	83,2
g1738	83,6	83,4
g1744	81,4	81,8
g1753	83,5	83,5
g1761	83,7	83,6
g3168	82,0	82,8
g3174	82,2	82,3
g3182	81,9	82,1
g3185	81,6	82,4

Tabela C20 – Número de octanos motor (MON) – Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,80003	$1,36 \times 10^{-6} (*)$
Validação	0,9141	0,001848(*)
Predição	0,9481	0,3393

(*) normalidade rejeitada

Tabela C21 – Número de octanos pesquisa (RON) – calibração

Amostra	IROX	Raman
g1081	94,1	94,4
g1083	95,2	95,2
g1085	94,7	94,9
g1090	94,8	94,7
g1095	95,3	95,3
g1096	96,2	95,6
g1294	94,8	94,8
g1302	95,2	95,2
g1315	95,6	95,4
g1322	95,7	95,6
g1328	95,1	95,3
g1335	95,5	95,7
g1342	95,4	95,4
g1493	95,0	95,2
g1495	95,7	95,9
g1504	95,3	95,3
g1506	95,4	95,4
g1507	95,6	95,5
g1510	93,0	92,8
g1513	95,2	94,9
g1633	94,1	94,7
g1637	96,1	95,8
g1640	94,4	94,5
g1643	95,9	95,7
g1644	95,5	95,1
g1647	94,6	95,5
g1650	95,7	95,6
g1654	96,3	95,9
g1657	95,6	94,8
g1677	96,3	96,3
g1698	96,0	96,1
g1728	94,9	95,4
g1731	95,6	95,8
g1734	96,1	96,2
g1736	93,5	93,8
g1740	94,5	94,6
g1742	93,4	93,4
g1746	96,1	96,4
g1748	96,4	96,3
g1749	96,6	96,4
g1750	96,3	96,4
g1758	95,9	95,9
g3165	95,5	95,4
g3171	96,0	95,6
g3178	95,4	95,0
g3184	95,7	95,8
g3187	95,7	95,7
g3190	94,7	94,8

Tabela C22 – Número de octanos pesquisa (RON) – validação

Amostra	IROX	Raman
g1081	94,1	94,9
g1083	95,2	95,3
g1085	94,7	95,2
g1090	94,8	94,9
g1095	95,3	95,1
g1096	96,2	95,2
g1294	94,8	95,0
g1302	95,2	95,3
g1315	95,6	95,2
g1322	95,7	95,6
g1328	95,1	95,4
g1335	95,5	95,7
g1342	95,4	95,4
g1493	95,0	95,4
g1495	95,7	96,0
g1504	95,3	95,6
g1506	95,4	95,5
g1507	95,6	95,4
g1510	93,0	90,9
g1513	95,2	94,8
g1633	94,1	94,9
g1637	96,1	95,7
g1640	94,4	94,7
g1643	95,9	95,6
g1644	95,5	95,0
g1647	94,6	95,7
g1650	95,7	95,5
g1654	96,3	95,7
g1657	95,6	94,6
g1677	96,3	96,2
g1698	96,0	96,1
g1728	94,9	95,7
g1731	95,6	95,7
g1734	96,1	96,2
g1736	93,5	94,3
g1740	94,5	94,8
g1742	93,4	94,0
g1746	96,1	96,3
g1748	96,4	96,1
g1749	96,6	96,2
g1750	96,3	96,2
g1758	95,9	95,8
g3165	95,5	95,4
g3171	96,0	95,2
g3178	95,4	94,9
g3184	95,7	96,0
g3187	95,7	95,7
g3190	94,7	95,1

Tabela C23 – Número de octanos pesquisa (RON) – predição

Amostra	IROX	Raman
g1086	93,5	95,2
g1091	95,1	95,3
g1098	95,1	95,0
g1298	95,1	95,3
g1305	96,2	96,1
g1338	94,8	95,1
g1497	95,7	95,1
g1508	96,2	95,4
g1634	95,3	95,2
g1651	95,1	95,2
g1660	96,0	95,8
g1709	95,6	96,1
g1738	96,2	96,2
g1744	93,0	93,6
g1753	96,3	96,2
g1761	96,5	96,4
g3168	95,7	95,7
g3174	95,7	95,4
g3182	95,5	95,2
g3185	95,5	95,9

Tabela C24 – Número de octanos pesquisa (RON) – Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9568	0,07516
Validação	0,9325	0,008455(*)
Predição	0,8730	0,01327(*)

(*) normalidade rejeitada

Tabela C25 – Índice antidetonante - calibração

Amostra	IROX	Raman
g1081	88,0	88,1
g1083	89,0	89,0
g1085	88,5	88,6
g1090	88,6	88,5
g1095	89,0	89,0
g1096	89,5	89,2
g1294	88,7	88,8
g1302	89,0	89,0
g1315	89,3	89,2
g1322	89,5	89,5
g1328	89,0	89,0
g1335	89,3	89,4
g1342	89,1	89,1
g1493	88,9	89,0
g1495	89,5	89,6
g1504	89,2	89,1
g1506	89,2	89,2
g1507	89,5	89,4
g1510	87,2	87,2
g1513	89,0	88,8
g1633	88,2	88,5
g1637	89,9	89,6
g1640	88,4	88,4
g1643	89,7	89,5
g1644	89,2	88,9
g1647	88,3	89,1
g1650	89,5	89,3
g1654	89,5	89,3
g1657	89,1	88,6
g1677	89,9	89,9
g1698	89,7	89,7
g1728	89,0	89,2
g1731	89,4	89,4
g1734	89,8	89,8
g1736	87,7	87,7
g1740	88,5	88,5
g1742	87,6	87,5
g1746	89,8	90,0
g1748	90,1	90,0
g1749	90,3	90,3
g1750	90,1	90,2
g1758	89,7	89,6
g3165	88,6	88,7
g3171	89,1	88,9
g3178	88,8	88,5
g3184	88,8	88,8
g3187	88,8	88,8
g3190	88,3	88,3

Tabela C26 – Índice antidetonante - validação

Amostra	IROX	Raman
g1081	88,0	88,7
g1083	89,0	89,0
g1085	88,5	88,9
g1090	88,6	88,6
g1095	89,0	88,9
g1096	89,5	88,9
g1294	88,7	88,8
g1302	89,0	88,9
g1315	89,3	89,0
g1322	89,5	89,2
g1328	89,0	89,1
g1335	89,3	89,4
g1342	89,1	89,0
g1493	88,9	89,2
g1495	89,5	89,7
g1504	89,2	89,3
g1506	89,2	89,3
g1507	89,5	89,2
g1510	87,2	86,0
g1513	89,0	88,6
g1633	88,2	88,7
g1637	89,9	89,4
g1640	88,4	88,4
g1643	89,7	89,3
g1644	89,2	88,8
g1647	88,3	89,5
g1650	89,5	89,3
g1654	89,5	89,4
g1657	89,1	88,5
g1677	89,9	89,8
g1698	89,7	89,7
g1728	89,0	89,4
g1731	89,4	89,1
g1734	89,8	89,7
g1736	87,7	88,3
g1740	88,5	88,6
g1742	87,6	87,7
g1746	89,8	89,9
g1748	90,1	89,7
g1749	90,3	89,9
g1750	90,1	89,8
g1758	89,7	89,4
g3165	88,6	89,0
g3171	89,1	88,8
g3178	88,8	88,3
g3184	88,8	89,2
g3187	88,8	89,0
g3190	88,3	88,4

Tabela C27 – Índice antidetonante - predição

Amostra	IROX	Raman
g1086	87,9	88,9
g1091	88,8	89,0
g1098	88,8	88,5
g1298	88,9	89,0
g1305	89,8	89,6
g1338	88,6	88,9
g1497	89,5	88,9
g1508	89,5	89,3
g1634	88,9	88,9
g1651	89,0	89,0
g1660	89,8	89,5
g1709	89,4	89,7
g1738	89,9	89,8
g1744	87,2	87,7
g1753	89,9	89,8
g1761	90,1	90,0
g3168	88,9	89,2
g3174	89,0	88,9
g3182	88,7	88,6
g3185	88,6	89,1

Tabela C28 – Índice antidetonante - Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,8537	$2,725 \times 10^{-5} (*)$
Validação	0,9624	0,1262
Predição	0,9404	0,2444

(*) normalidade rejeitada

Tabela C29 - densidade relativa – calibração

Amostra	referência	Raman
g1081	0,754	0,754
g1083	0,754	0,754
g1085	0,754	0,754
g1090	0,755	0,756
g1095	0,756	0,757
g1096	0,754	0,754
g1294	0,756	0,756
g1302	0,746	0,746
g1315	0,756	0,756
g1322	0,756	0,756
g1328	0,755	0,755
g1335	0,756	0,755
g1342	0,755	0,755
g1493	0,756	0,757
g1495	0,755	0,754
g1504	0,756	0,756
g1506	0,755	0,755
g1507	0,756	0,757
g1510	0,758	0,758
g1513	0,755	0,755
g1633	0,751	0,751
g1637	0,758	0,758
g1640	0,751	0,751
g1643	0,758	0,757
g1644	0,757	0,756
g1647	0,757	0,758
g1650	0,758	0,758
g1654	0,759	0,758
g1657	0,750	0,750
g1677	0,758	0,760
g1698	0,759	0,759
g1728	0,755	0,755
g1731	0,760	0,760
g1734	0,758	0,758
g1736	0,757	0,757
g1740	0,754	0,754
g1742	0,760	0,760
g1746	0,758	0,758
g1748	0,758	0,758
g1749	0,759	0,760
g1750	0,759	0,759
g1758	0,760	0,761
g3165	0,758	0,758
g3171	0,748	0,747
g3178	0,753	0,753
g3184	0,757	0,757
g3187	0,757	0,757
g3190	0,738	0,739

Tabela C30 - densidade relativa – validação

Amostra	referência	Raman
g1081	0,754	0,752
g1083	0,754	0,754
g1085	0,754	0,755
g1090	0,755	0,752
g1095	0,756	0,756
g1096	0,754	0,754
g1294	0,756	0,754
g1302	0,746	0,754
g1315	0,756	0,754
g1322	0,756	0,755
g1328	0,755	0,757
g1335	0,756	0,756
g1342	0,755	0,755
g1493	0,756	0,756
g1495	0,755	0,754
g1504	0,756	0,755
g1506	0,755	0,756
g1507	0,756	0,757
g1510	0,758	0,752
g1513	0,755	0,752
g1633	0,751	0,751
g1637	0,758	0,757
g1640	0,751	0,753
g1643	0,758	0,756
g1644	0,757	0,755
g1647	0,757	0,757
g1650	0,758	0,757
g1654	0,759	0,757
g1657	0,75	0,752
g1677	0,758	0,761
g1698	0,759	0,758
g1728	0,755	0,757
g1731	0,76	0,761
g1734	0,758	0,759
g1736	0,757	0,759
g1740	0,754	0,752
g1742	0,76	0,759
g1746	0,758	0,76
g1748	0,758	0,76
g1749	0,759	0,759
g1750	0,759	0,759
g1758	0,76	0,756
g3165	0,758	0,753
g3171	0,748	0,753
g3178	0,753	0,75
g3184	0,757	0,752
g3187	0,757	0,754
g3190	0,738	0,755

Tabela C31 - densidade relativa – predição

Amostra	referência	Raman
g1086	0,755	0,755
g1091	0,756	0,754
g1098	0,756	0,751
g1298	0,756	0,753
g1305	0,76	0,76
g1338	0,756	0,756
g1497	0,755	0,755
g1508	0,757	0,757
g1634	0,756	0,755
g1651	0,756	0,755
g1660	0,759	0,758
g1709	0,757	0,757
g1738	0,76	0,759
g1744	0,758	0,761
g1753	0,758	0,758
g1761	0,76	0,76
g3168	0,758	0,757
g3174	0,758	0,755
g3182	0,757	0,753
g3185	0,757	0,755

Tabela C32 - densidade relativa – Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,7542	$1,383 \times 10^{-7} (*)$
Validação	0,7934	$9,244 \times 10^{-7} (*)$
Predição	0,9004	0,04189

(*) normalidade rejeitada

Tabela C33 – Ponto de ebulição inicial – calibração

Amostra	referência	Raman
g1081	44,4	44,8
g1083	44,7	44,6
g1085	45,3	45,5
g1090	44,6	44,1
g1095	44,4	44,5
g1096	44,2	44,4
g1294	44,6	44,4
g1302	47,0	46,8
g1315	44,9	45,2
g1322	45,2	45,1
g1328	47,0	47,2
g1335	46,2	46,2
g1342	44,7	44,9
g1493	46,4	46,2
g1495	45,7	45,9
g1504	45,6	45,5
g1506	46,3	46,8
g1507	44,7	45,0
g1510	44,6	44,6
g1513	43,0	42,2
g1633	41,8	42,5
g1637	41,9	43,9
g1640	41,9	43,1
g1643	45,9	45,0
g1644	45,3	44,2
g1647	45,1	44,5
g1650	45,6	45,2
g1654	45,3	45,2
g1657	42,6	42,6
g1677	44,6	45,1
g1698	45,4	45,3
g1728	44,6	44,6
g1731	44,4	45,2
g1734	45,0	45,0
g1736	44,9	44,6
g1740	43,3	43,0
g1742	44,5	44,3
g1746	45,4	45,5
g1748	44,7	45,0
g1749	46,1	45,9
g1750	44,4	45,0
g1758	43,8	43,7
g3165	43,8	44,0
g3171	42,2	42,6
g3178	43,5	43,3
g3184	44,8	44,1
g3187	46,5	45,0
g3190	44,5	43,7

Tabela C34 – Ponto de ebulição inicial – validação

Amostra	referência	Raman
g1081	44,4	45,2
g1083	44,7	44,3
g1085	45,3	44,7
g1090	44,6	44,3
g1095	44,4	44,9
g1096	44,2	44,6
g1294	44,6	44,4
g1302	47,0	44,8
g1315	44,9	45,7
g1322	45,2	44,7
g1328	47,0	45,4
g1335	46,2	44,9
g1342	44,7	44,9
g1493	46,4	45,4
g1495	45,7	45,9
g1504	45,6	45,5
g1506	46,3	45,7
g1507	44,7	45,4
g1510	44,6	45,0
g1513	43,0	43,4
g1633	41,8	43,1
g1637	41,9	44,7
g1640	41,9	43,8
g1643	45,9	44,4
g1644	45,3	43,7
g1647	45,1	44,2
g1650	45,6	44,9
g1654	45,3	44,9
g1657	42,6	42,9
g1677	44,6	45,1
g1698	45,4	45,1
g1728	44,6	44,8
g1731	44,4	46,3
g1734	45,0	45,2
g1736	44,9	44,0
g1740	43,3	43,2
g1742	44,5	45,4
g1746	45,4	45,4
g1748	44,7	45,4
g1749	46,1	45,1
g1750	44,4	45,7
g1758	43,8	44,2
g3165	43,8	44,8
g3171	42,2	44,0
g3178	43,5	44,1
g3184	44,8	44,5
g3187	46,5	44,2
g3190	44,5	43,8

Tabela C35 – Ponto de ebulição inicial – predição

Amostra	referência	Raman
g1086	45,6	44,5
g1091	45,2	45,0
g1098	46,5	46,7
g1298	45,2	45,3
g1305	45,1	46,0
g1338	45,6	45,5
g1497	45,3	45,0
g1508	45,7	45,7
g1634	44,4	44,2
g1651	45,5	44,7
g1660	45,5	45,3
g1709	45,4	45,0
g1738	46,1	44,9
g1744	43,2	45,9
g1753	42,1	42,4
g1761	43,9	44,0
g3168	46,3	45,3
g3174	45,6	45,2
g3182	47,2	44,8
g3185	46,6	43,8

Tabela C36 – Ponto de ebulição inicial - Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9446	0,02451
Validação	0,9887	0,9210
Predição	0,9032	0,04745

Tabela C37 – Ponto de ebulição 10% destilado – calibração

Amostra	referência	Raman
g1081	56,1	56,5
g1083	56,9	56,6
g1085	56,1	56,5
g1090	56,8	56,4
g1095	57,9	56,7
g1096	56,6	56,6
g1294	57,7	56,7
g1302	57,8	56,7
g1315	57,8	56,7
g1322	57,1	56,6
g1328	56,9	56,6
g1335	57,5	56,6
g1342	57,3	56,6
g1493	57,6	57,1
g1495	57,3	57,2
g1504	57,5	57,2
g1506	57,1	57,2
g1507	57,0	57,1
g1510	59,1	60,1
g1513	56,2	56,5
g1633	52,5	56,3
g1637	53,4	56,6
g1640	54,5	56,2
g1643	56,8	56,5
g1644	56,8	56,4
g1647	56,8	56,6
g1650	57,3	56,7
g1654	57,4	56,7
g1657	55,7	56,4
g1677	57,4	56,8
g1698	57,1	56,8
g1728	56,3	56,7
g1731	57,0	57,4
g1734	57,8	56,9
g1736	58,9	58,7
g1740	55,9	56,6
g1742	59,6	59,4
g1746	57,3	56,8
g1748	56,5	56,8
g1749	57,2	56,8
g1750	58,2	56,8
g1758	57,6	56,8
g3165	57,5	56,5
g3171	53,8	57,2
g3178	57,3	56,5
g3184	58,1	57,0
g3187	58,0	56,7
g3190	53,4	56,5

Tabela C38 – Ponto de ebulição 10% destilado – validação

Amostra	referência	Raman
g1081	56,5	56,1
g1083	56,6	56,9
g1085	56,5	56,1
g1090	56,4	56,8
g1095	56,6	57,9
g1096	56,6	56,6
g1294	56,6	57,7
g1302	56,6	57,8
g1315	56,6	57,8
g1322	56,6	57,1
g1328	56,6	56,9
g1335	56,6	57,5
g1342	56,6	57,3
g1493	57,1	57,6
g1495	57,2	57,3
g1504	57,1	57,5
g1506	57,2	57,1
g1507	57,1	57,0
g1510	60,5	59,1
g1513	56,6	56,2
g1633	56,5	52,5
g1637	56,8	53,4
g1640	56,4	54,5
g1643	56,5	56,8
g1644	56,4	56,8
g1647	56,6	56,8
g1650	56,6	57,3
g1654	56,6	57,4
g1657	56,4	55,7
g1677	56,8	57,4
g1698	56,8	57,1
g1728	56,7	56,3
g1731	57,4	57,0
g1734	56,8	57,8
g1736	58,6	58,9
g1740	56,7	55,9
g1742	59,3	59,6
g1746	56,8	57,3
g1748	56,8	56,5
g1749	56,8	57,2
g1750	56,8	58,2
g1758	56,8	57,6
g3165	56,5	57,5
g3171	58,2	53,8
g3178	56,4	57,3
g3184	56,8	58,1
g3187	56,7	58,0
g3190	56,7	53,4

Tabela C39 – Ponto de ebulição 10% destilado – predição

Amostra	referência	Raman
g1086	56,6	56,7
g1091	57,8	56,6
g1098	57,9	56,5
g1298	57,5	56,6
g1305	56,7	56,8
g1338	57,5	57,0
g1497	57,4	57,0
g1508	57,2	57,2
g1634	57,0	56,5
g1651	56,9	56,4
g1660	57,7	56,6
g1709	57,9	56,8
g1738	57,5	56,8
g1744	58,2	59,1
g1753	56,9	56,8
g1761	57,1	56,8
g3168	58,2	56,6
g3174	58,2	56,5
g3182	58,3	56,5
g3185	57,9	57,1

Tabela C40 – Ponto de ebulição 10% destilado – Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,7897	$7,655 \times 10^{-7} (*)$
Validação	0,7769	$4,053 \times 10^{-7} (*)$
Predição	0,9747	0,8496

(*) normalidade rejeitada

Tabela C41 – Ponto de ebulição 50% destilado – calibração

Amostra	referência	Raman
g1081	73,9	73,9
g1083	74,1	74,3
g1085	73,8	73,9
g1090	74,0	74,0
g1095	74,4	74,4
g1096	73,9	74,0
g1294	74,1	74,2
g1302	73,3	73,1
g1315	73,7	73,6
g1322	73,4	73,4
g1328	73,4	73,4
g1335	73,5	73,1
g1342	73,9	73,9
g1493	73,6	73,3
g1495	72,0	72,0
g1504	73,1	73,3
g1506	73,5	73,8
g1507	72,8	72,7
g1510	73,7	73,4
g1513	73,8	74,2
g1633	73,4	73,4
g1637	72,4	72,6
g1640	73,2	73,6
g1643	72,8	72,7
g1644	73,9	73,7
g1647	72,8	72,7
g1650	72,9	73,0
g1654	72,9	72,7
g1657	73,7	73,5
g1677	72,8	72,9
g1698	72,8	72,7
g1728	72,8	72,7
g1731	73,4	73,3
g1734	73,0	72,8
g1736	74,2	74,3
g1740	73,7	73,8
g1742	74,2	74,6
g1746	73,1	72,9
g1748	72,9	72,9
g1749	73,1	72,9
g1750	73,5	73,3
g1758	73,0	73,1
g3165	73,3	72,9
g3171	72,2	72,4
g3178	72,9	72,5
g3184	73,2	73,1
g3187	72,9	72,7
g3190	70,1	71,3

Tabela C42 – Ponto de ebulição 50% destilado – validação

Amostra	referência	Raman
g1081	73,9	73,7
g1083	74,1	73,9
g1085	73,8	73,9
g1090	74,0	73,4
g1095	74,4	73,8
g1096	73,9	73,9
g1294	74,1	73,5
g1302	73,3	73,1
g1315	73,7	73,4
g1322	73,4	73,2
g1328	73,4	73,8
g1335	73,5	73,0
g1342	73,9	73,6
g1493	73,6	72,7
g1495	72,0	73,3
g1504	73,1	72,6
g1506	73,5	73,1
g1507	72,8	72,7
g1510	73,7	74,4
g1513	73,8	73,5
g1633	73,4	73,4
g1637	72,4	72,8
g1640	73,2	74,0
g1643	72,8	72,9
g1644	73,9	73,5
g1647	72,8	72,8
g1650	72,9	73,2
g1654	72,9	72,8
g1657	73,7	73,2
g1677	72,8	73,0
g1698	72,8	72,8
g1728	72,8	73,0
g1731	73,4	73,3
g1734	73,0	72,7
g1736	74,2	74,2
g1740	73,7	73,9
g1742	74,2	74,2
g1746	73,1	72,8
g1748	72,9	73,1
g1749	73,1	72,8
g1750	73,5	73,0
g1758	73,0	73,0
g3165	73,3	72,2
g3171	72,2	73,1
g3178	72,9	71,8
g3184	73,2	72,7
g3187	72,9	72,5
g3190	70,1	72,9

Tabela C43 – Ponto de ebulição 50% destilado – predição

Amostra	referência	Raman
g1086	74,0	73,6
g1091	74,2	73,6
g1098	74,1	73,4
g1298	73,5	73,5
g1305	73,6	73,3
g1338	73,5	73,5
g1497	73,5	73,0
g1508	72,6	72,9
g1634	73,2	73,2
g1651	72,9	73,0
g1660	72,8	72,9
g1709	73,1	72,9
g1738	73,0	73,0
g1744	74,1	74,6
g1753	73,1	73,0
g1761	73,0	72,9
g3168	73,3	73,0
g3174	73,2	72,9
g3182	73,4	72,9
g3185	73,0	73,3

Tabela C44 – Ponto de ebulição 50% destilado – Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,8477	$1,894 \times 10^{-5} (*)$
Validação	0,8031	$6,723 \times 10^{-6} (*)$
Predição	0,9773	0,8953

(*) normalidade rejeitada

Tabela C45 – Ponto de ebulição 50% destilado – calibração

Amostra	referência	Raman
g1081	174,8	174,1
g1083	173,6	174,0
g1085	173,4	174,6
g1090	173,7	172,0
g1095	175,5	176,0
g1096	174,4	173,8
g1294	175,2	171,6
g1302	174,5	173,4
g1315	174,8	174,5
g1322	174,6	173,4
g1328	171,5	173,8
g1335	175,0	175,4
g1342	175,8	175,3
g1493	177,3	174,1
g1495	171,8	174,0
g1504	170,9	171,5
g1506	171,2	172,4
g1507	169,3	172,5
g1510	165,6	163,6
g1513	170,5	168,6
g1633	172,7	171,9
g1637	170,5	172,9
g1640	171,1	173,8
g1643	173,6	174,7
g1644	177,1	173,8
g1647	172,8	173,8
g1650	174,6	174,8
g1654	174,1	174,2
g1657	173,7	170,7
g1677	175,4	174,9
g1698	173,6	175,4
g1728	170,0	173,4
g1731	172,0	173,7
g1734	174,7	175,5
g1736	158,8	160,9
g1740	176,4	174,3
g1742	155,1	155,0
g1746	174,7	177,4
g1748	176,1	175,4
g1749	175,1	175,6
g1750	175,0	176,8
g1758	175,8	172,9
g3165	174,1	170,5
g3171	160,7	163,1
g3178	169,1	166,0
g3184	174,4	170,2
g3187	175,3	170,6
g3190	156,0	164,8

Tabela C46 – Ponto de ebulição 50% destilado – validação

Amostra	referência	Raman
g1081	174,8	173,9
g1083	173,6	174,3
g1085	173,4	175,4
g1090	173,7	172,0
g1095	175,5	175,7
g1096	174,4	173,4
g1294	175,2	170,2
g1302	174,5	172,8
g1315	174,8	173,8
g1322	174,6	172,7
g1328	171,5	175,4
g1335	175,0	175,1
g1342	175,8	174,5
g1493	177,3	172,1
g1495	171,8	175,6
g1504	170,9	172,2
g1506	171,2	173,6
g1507	169,3	173,8
g1510	165,6	155,7
g1513	170,5	170,2
g1633	172,7	172,1
g1637	170,5	173,3
g1640	171,1	175,1
g1643	173,6	174,8
g1644	177,1	173,1
g1647	172,8	173,9
g1650	174,6	174,7
g1654	174,1	174,0
g1657	173,7	170,2
g1677	175,4	174,0
g1698	173,6	175,5
g1728	170,0	174,7
g1731	172,0	173,5
g1734	174,7	174,7
g1736	158,8	164,0
g1740	176,4	173,0
g1742	155,1	157,9
g1746	174,7	177,2
g1748	176,1	174,1
g1749	175,1	174,9
g1750	175,0	176,5
g1758	175,8	171,3
g3165	174,1	169,4
g3171	160,7	169,3
g3178	169,1	165,8
g3184	174,4	166,8
g3187	175,3	169,3
g3190	156,0	171,1

Tabela C47 – Ponto de ebulição 90% destilado – predição

Amostra	referência	Raman
g1086	173,0	173,2
g1091	175,3	174,1
g1098	174,1	170,9
g1298	175,2	173,7
g1305	178,8	176,1
g1338	173,5	172,3
g1497	172,6	173,0
g1508	171,3	171,8
g1634	172,2	173,7
g1651	175,0	173,6
g1660	174,9	175,0
g1709	173,8	174,0
g1738	177,8	175,8
g1744	160,7	161,9
g1753	174,3	174,5
g1761	175,0	174,5
g3168	177,9	174,0
g3174	175,1	171,4
g3182	175,3	169,7
g3185	175,4	168,1

Tabela C48 – Ponto de ebulição 90% destilado – Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9505	0,04193
Validação	0,9520	0,04827
Predição	0,9169	0,08654

Tabela C49 – Ponto de ebulição final – calibração

Amostra	referência	Raman
g1081	211,0	210,8
g1083	208,4	208,1
g1085	208,9	208,5
g1090	206,0	202,8
g1095	209,7	209,0
g1096	210,2	210,5
g1294	208,2	207,8
g1302	212,4	212,5
g1315	210,4	209,6
g1322	210,9	210,2
g1328	211,7	210,4
g1335	209,3	207,9
g1342	212,1	212,2
g1493	214,2	212,9
g1495	211,6	211,3
g1504	210,1	209,0
g1506	213,6	213,9
g1507	208,6	209,8
g1510	198,5	198,7
g1513	211,8	213,0
g1633	208,0	209,6
g1637	207,2	210,3
g1640	208,8	209,8
g1643	214,8	214,0
g1644	218,0	215,0
g1647	212,3	213,1
g1650	214,1	212,8
g1654	211,2	211,5
g1657	211,4	210,7
g1677	212,9	215,3
g1698	213,4	214,5
g1728	212,1	212,6
g1731	218,6	219,1
g1734	212,9	212,7
g1736	193,7	193,5
g1740	219,4	219,3
g1742	193,9	193,6
g1746	214,8	215,4
g1748	213,6	213,9
g1749	214,7	215,6
g1750	216,7	217,1
g1758	219,7	220,1
g3165	213,7	212,2
g3171	200,3	202,6
g3178	209,4	207,0
g3184	215,8	215,6
g3187	214,8	214,2
g3190	195,5	198,9

Tabela C50 – Ponto de ebulição final - validação

Amostra	referência	Raman
g1081	211,0	208,2
g1083	208,4	212,5
g1085	208,9	212,4
g1090	206,0	210,1
g1095	209,7	214,0
g1096	210,2	210,5
g1294	208,2	207,6
g1302	212,4	211,1
g1315	210,4	210,3
g1322	210,9	209,8
g1328	211,7	211,3
g1335	209,3	212,3
g1342	212,1	212,1
g1493	214,2	209,3
g1495	211,6	212,9
g1504	210,1	211,1
g1506	213,6	211,8
g1507	208,6	214,0
g1510	198,5	187,8
g1513	211,8	210,1
g1633	208,0	212,0
g1637	207,2	212,5
g1640	208,8	212,4
g1643	214,8	212,5
g1644	218,0	211,0
g1647	212,3	212,9
g1650	214,1	211,6
g1654	211,2	211,7
g1657	211,4	209,7
g1677	212,9	215,0
g1698	213,4	214,4
g1728	212,1	214,8
g1731	218,6	210,3
g1734	212,9	214,0
g1736	193,7	202,4
g1740	219,4	211,3
g1742	193,9	194,1
g1746	214,8	216,6
g1748	213,6	214,1
g1749	214,7	215,6
g1750	216,7	216,1
g1758	219,7	212,3
g3165	213,7	208,8
g3171	200,3	208,6
g3178	209,4	204,0
g3184	215,8	207,7
g3187	214,8	211,3
g3190	195,5	210,8

Tabela C51 – Ponto de ebulição final - predição

Amostra	referência	Raman
g1086	173,0	173,8
g1091	175,3	174,2
g1098	174,1	171,9
g1298	175,2	172,4
g1305	178,8	175,6
g1338	173,5	172,3
g1497	172,6	171,5
g1508	171,3	170,4
g1634	172,2	174,0
g1651	175,0	174,5
g1660	174,9	174,5
g1709	173,8	174,5
g1738	177,8	174,0
g1744	160,7	160,4
g1753	174,3	173,5
g1761	175,0	173,9
g3168	177,9	174,2
g3174	175,1	170,8
g3182	175,3	169,6
g3185	175,4	169,6

Tabela C52 – Ponto de ebulição final Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9672	0,1968
Validação	0,9669	0,1920
Predição	0,9493	0,3564

Tabela C53 – Teor % de etanol em volume – calibração

Amostra	referência	Raman
g1081	24,0	23,4
g1083	23,0	23,2
g1085	23,0	22,8
g1090	23,0	23,4
g1095	23,0	22,8
g1096	23,0	22,8
g1294	24,0	23,6
g1302	24,0	24,0
g1315	24,0	23,9
g1322	23,0	23,1
g1328	23,0	22,9
g1335	23,0	22,8
g1342	23,0	23,2
g1493	23,0	22,9
g1495	23,0	23,3
g1504	23,0	23,4
g1506	23,0	22,8
g1507	23,0	23,1
g1510	23,0	23,2
g1513	23,0	23,0
g1633	23,0	23,4
g1637	23,0	23,2
g1640	23,0	23,2
g1643	23,0	22,9
g1644	23,0	23,1
g1647	23,0	22,9
g1650	23,0	23,0
g1654	23,0	23,2
g1657	23,0	23,5
g1677	23,0	22,8
g1698	23,0	23,1
g1728	23,0	23,4
g1731	23,0	23,1
g1734	23,0	22,9
g1736	23,0	22,8
g1740	23,0	23,0
g1742	23,0	23,0
g1746	23,0	23,5
g1748	23,0	22,8
g1749	23,0	23,4
g1750	24,0	23,2
g1758	23,0	23,3
g3165	24,0	24,2
g3171	24,0	23,6
g3178	25,0	24,7
g3184	24,0	24,4
g3187	25,0	24,1
g3190	25,0	24,9

Tabela C54 – Teor % de etanol em volume – validação

referência	Raman
24,0	23,0
23,0	23,3
23,0	22,9
23,0	23,7
23,0	22,9
23,0	22,8
24,0	23,1
24,0	23,6
24,0	23,5
23,0	23,2
23,0	23,0
23,0	22,9
23,0	23,3
23,0	23,1
23,0	23,7
23,0	23,8
23,0	23,4
23,0	23,3
23,0	23,8
23,0	23,4
23,0	23,4
23,0	23,3
23,0	23,3
23,0	22,9
23,0	23,1
23,0	23,0
23,0	23,1
23,0	23,3
23,0	23,5
23,0	22,9
23,0	23,1
23,0	23,6
23,0	23,2
23,0	23,0
23,0	22,5
23,0	23,1
23,0	22,7
23,0	23,7
23,0	22,8
23,0	23,5
24,0	22,8
23,0	23,3
24,0	24,2
24,0	23,1
25,0	24,1
24,0	24,3
25,0	23,7
25,0	24,5

Tabela C55 – Teor % de etanol em volume – predição

Amostra	referência	Raman
g1086	23,0	22,8
g1091	24,0	23,2
g1098	24,0	23,5
g1298	23,0	23,2
g1305	23,0	22,8
g1338	23,0	23,0
g1497	24,0	23,4
g1508	23,0	23,1
g1634	24,0	23,4
g1651	24,0	23,3
g1660	23,0	22,8
g1709	23,0	23,1
g1738	23,0	23,0
g1744	23,0	22,4
g1753	23,0	22,9
g1761	23,0	23,0
g3168	25,0	23,9
g3174	24,0	23,7
g3182	24,0	24,2
g3185	24,0	23,4

Tabela C56 – Teor % de etanol em volume – Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9535	0,02223
Validação	0,9318	0,00795(*)
Predição	0,9355	0,19690

(*) normalidade rejeitada

Tabela C57 – Teor % de etanol IROX – calibração

Amostra	referência	Raman
g1081	21,9	22,0
g1083	22,5	22,5
g1085	22,6	22,7
g1090	23,1	23,3
g1095	23,5	23,6
g1096	23,0	23,0
g1294	22,7	22,5
g1302	23,5	23,5
g1315	23,1	23,3
g1322	22,8	22,7
g1328	22,3	22,5
g1335	22,7	22,8
g1342	23,1	23,1
g1493	22,3	22,1
g1495	22,6	22,5
g1504	23,1	23,3
g1506	22,8	22,8
g1507	22,9	23,1
g1510	23,8	23,8
g1513	23,0	22,9
g1633	22,5	22,0
g1637	22,9	22,6
g1640	22,7	23,0
g1643	22,7	23,0
g1644	22,7	22,7
g1647	22,7	22,3
g1650	22,5	22,6
g1654	22,7	22,5
g1657	22,9	22,7
g1677	23,3	23,6
g1698	22,9	23,2
g1728	21,9	21,7
g1731	22,3	22,3
g1734	22,6	22,6
g1736	22,6	22,6
g1740	21,9	21,9
g1742	24,4	24,4
g1746	22,5	22,6
g1748	22,5	22,5
g1749	22,3	22,1
g1750	22,6	22,7
g1758	23,0	22,8
g3165	25,3	25,5
g3171	25,8	25,6
g3178	25,7	25,7
g3184	25,7	25,3
g3187	25,3	25,5
g3190	25,5	25,4

Tabela C58 – Teor % de etanol IROX – validação

referência	Raman
23,0	22,0
23,0	22,5
22,7	22,7
22,8	23,3
22,8	23,6
23,2	23,0
23,7	22,5
23,3	23,5
22,9	23,3
23,3	22,7
22,5	22,5
22,8	22,8
23,1	23,1
22,8	22,1
23,7	22,5
22,9	23,3
22,8	22,8
22,8	23,1
23,1	23,8
23,4	22,9
22,7	22,0
23,1	22,6
22,3	23,0
22,5	23,0
22,6	22,7
22,8	22,3
22,4	22,6
22,9	22,5
22,8	22,7
23,0	23,6
22,7	23,2
22,7	21,7
23,0	22,3
23,0	22,6
23,0	22,6
22,0	21,9
24,1	24,4
22,7	22,6
23,0	22,5
22,7	22,1
22,6	22,7
23,2	22,8
24,6	25,5
24,7	25,6
25,0	25,7
25,4	25,3
24,7	25,5
24,9	25,4

Tabela C59 – Teor % de etanol IROX – predição

Amostra	referência	Raman
g1086	22,8	23,0
g1091	23,2	22,7
g1098	23,1	23,7
g1298	23,2	22,8
g1305	23,2	23,2
g1338	22,7	22,7
g1497	23,4	22,9
g1508	23,0	22,7
g1634	22,8	22,6
g1651	22,9	22,7
g1660	22,8	22,5
g1709	23,3	23,0
g1738	22,3	22,7
g1744	23,2	22,9
g1753	23,0	22,9
g1761	22,7	22,8
g3168	25,2	23,6
g3174	25,5	24,3
g3182	25,7	24,7
g3185	25,3	24,9

Tabela C60 – Teor % de etanol IROX – Resultado do teste de normalidade dos resíduos (Shapiro-wilk)

	W	p-valor
Calibração	0,9474	0,0316
Validação	0,9667	0,1884
Predição	0,9322	0,1701