

1 Introdução

Verifica-se, nos dias atuais, uma crescente busca pela melhoria da qualidade dos combustíveis derivados de petróleo, do gás natural e do álcool combustível, principalmente através das especificações regulamentadas pela Agência Nacional do petróleo (ANP), que refletem a qualidade mínima necessária ao bom desempenho destes produtos. Essa regulamentação atende à política energética nacional quanto à adequação ao uso, ao meio ambiente e aos interesses do consumidor, considerando a realidade nacional (4).

Com o objetivo de verificar a manutenção da qualidade acima mencionada, a ANP desenvolve o Programa de Monitoramento da Qualidade dos Combustíveis, iniciado em 1999, que apresenta como objetivos principais avaliar permanentemente a qualidade dos combustíveis comercializados no país e mapear problemas de não-conformidades para direcionar as ações de fiscalização.

Em razão das dimensões nacionais, da impossibilidade logística de avaliar a qualidade dos combustíveis num único laboratório e da existência de um número expressivo de laboratórios em Universidades e Institutos de Pesquisa, a ANP estabeleceu convênios com diversas instituições que atuam hoje no monitoramento da qualidade dos combustíveis brasileiros, incluindo a PUC-Rio, onde é feito o monitoramento dos combustíveis vendidos em postos do Espírito Santo (4).

Além disso, há uma crescente demanda para o desenvolvimento de novas metodologias que tornem as análises envolvidas no controle da qualidade dos combustíveis mais rápidas, simples e com menor custo.

Com esse objetivo, o presente trabalho estuda a viabilidade de um método químico analítico de bancada, usando a aquisição de espectros na região do infravermelho médio ($4000-600\text{cm}^{-1}$) e a análise dos dados por mínimos quadrados parciais (PLS), com o objetivo de determinar as seguintes propriedades de gasolinas: MON, RON, densidade, temperaturas de destilação, teores de álcool, saturados, aromáticos, olefinas e benzeno.

Devido a não disponibilidade de métodos-padrão de referência para a determinação de MON, RON e dos teores de álcool, saturados, aromáticos,

olefinas e benzeno, usou-se o IROX, equipamento portátil, baseado em infravermelho próximo e ferramentas de regressão multivariada, utilizado no Laboratório de Combustíveis da PUC-Rio. Esse equipamento foi previamente calibrado com gasolinas brasileiras para MON e RON, mas não para a composição química das gasolinas.

Por conta disso, um estudo prévio feito com misturas de solventes, simulando gasolinas, foi realizado para verificar a viabilidade do método em termos de composição química, além de servir de conjunto calibração para predição dessas propriedades nas gasolinas.

Como justificativa para a realização deste trabalho, algumas vantagens do método estudado podem ser mencionadas: os equipamentos de infravermelho por transformada de Fourier (FTIR) são bastante difundidos nos laboratórios de química analítica, apresentam baixo custo e técnicas de manipulação (quando necessárias) bastante conhecidas. É uma técnica de fácil automação, através do uso de amostradores automáticos e sistemas FIA, por exemplo, e apropriada para melhorar a produtividade dos laboratórios.