

8 Conclusões

O estudo prévio realizado com as misturas de solventes, utilizando o método FTIR-PLS para a predição dos teores de benzeno, aromáticos, saturados, olefinas e etanol, indicou a viabilidade de sua aplicação em gasolinas, além de fornecer informações quanto às variáveis e aos tipos de pré-tratamentos que forneceriam os melhores resultados.

Os resultados apresentados mostram que o método FTIR-PLS para a determinação de propriedades de gasolinas comerciais pode ser considerado satisfatório, com relação à exatidão e a precisão, para as propriedades cujos modelos PLS foram construídos a partir de valores obtidos de métodos-padrão de referência, com exceção do ponto de ebulição inicial. No entanto, os modelos construídos para a maioria dessas propriedades foram considerados restritos e precisam ser ampliados com um conjunto de amostras mais representativo.

No caso das propriedades cujos modelos PLS tiveram como método de referência o equipamento IROX, os resultados obtidos não foram satisfatórios, com valores de erro da predição maiores que o desejado. As propriedades MON e RON foram as únicas que apresentaram erros relativos menores que 10% para todas as amostras do conjunto teste e valores de RMSEP realmente baixos. Apesar disso, os modelos construídos para essas propriedades foram também considerados bastante restritos e precisam ser ampliados com um conjunto de amostras mais representativo.

Ainda assim, o método FTIR-PLS mostrou-se bastante promissor como uma alternativa para análise de gasolinas, apresentando diversas vantagens, tais como:

- menor tempo de análise - entre a coleta do espectro infravermelho e os cálculos do programa estatístico, gasta-se, em média, 15 minutos para a obtenção dos valores de todas as treze propriedades estudadas;

- menor custo - menor gasto de amostras e de reagentes e equipamento de mais fácil acesso, principalmente se comparado ao motor CFR para determinação de MON e RON;
- é uma técnica limpa - não há nenhum tipo de preparo da amostra e o único rejeito gerado é a acetona usada para lavar a célula túnel.

Apesar das vantagens apresentadas, a avaliação dos autores sugere que os resultados obtidos no presente trabalho devem ser melhorados. Para atingir tal objetivo, é necessário a utilização de um número maior de amostras de calibração, de preferência formando um conjunto mais representativo, ou seja, com a maior variação possível dos valores das propriedades das gasolinas que o constituem. Além disso, a utilização de métodos-padrão de referência para todas as propriedades é necessária para garantir resultados mais exatos e precisos.

Pode-se mencionar, ainda, a utilização da célula ATR plana, no lugar da célula túnel, para melhorar os resultados e diminuir o tempo da análise.

Outras alternativas poderiam também ser estudadas, tais como:

- utilização de diferentes métodos de regressão multivariada como alternativa ao PLS;
- utilização de técnicas estatísticas de seleção de variáveis, como algoritmos genéticos e redes neurais;

estudo sobre a manutenção das calibrações FTIR-PLS ao longo do tempo.