

## 6 Conclusões

O método FT-Raman – PLS empregado se mostrou satisfatório para previsão dos teores de parafinas, olefinas, naftênicos e aromáticos em amostras de gasolinas.

Para o caso do teor de olefinas, foi encontrado o melhor resultado para predição, mostrando-se um método promissor para uso em laboratórios de controle.

Em relação ao etanol o método se mostrou satisfatório, apesar do valor do coeficiente de correlação da curva de predição não apresentar um valor próximo a 1. Quando se observa a tabela 14, verifica-se que as amostras estão muito parecidas quanto ao teor de álcool etílico anidro combustível (AEAC) não havendo uma variação significativa, o que contribui para o baixo coeficiente de correlação linear da curva de predição. Em contra-partida, o valor de predição RMSEP = 0,39 demonstra que o modelo PLS para o teor de etanol está bem ajustado e foi bem desenvolvido.

Os resultados apresentados mostram que o método FT-Raman – PLS para a predição de composição de gasolinas comerciais foi considerado satisfatório, com relação à exatidão e a precisão, a partir de valores obtidos usando a cromatografia gasosa como método-padrão de referência. No entanto, os modelos construídos, precisam ser testados quanto a repetibilidade e a reprodutibilidade do método, uma vez que o universo de variação na composição química da gasolina é grande.

O fato de se considerar algumas amostras como anômalas na determinação do modelo PLS de predição de todas as propriedades, mesmo que estas amostras estejam dentro da faixa de teor médio, pode estar relacionado à pequena faixa de variação entre os valores de alguns dos teores medidos. Alguns problemas experimentais, tais como variação de tensão elétrica em horários de picos de consumo, durante a obtenção dos espectros FT-Raman podem ter contribuído para a anomalia dessas amostras.

Mesmo assim, o método FT-Raman – PLS mostrou-se bastante promissor como uma alternativa na análise de gasolinas para se determinar a composição (PEONA) de amostras de gasolinas em substituição a cromatografia

gasosa (CG) por ser rápido, em média de 3 min para obtenção do espectro FT-Raman e em torno de 5 min para predição via PLS; é uma técnica limpa; trabalha com uma alíquota de amostra em torno de 2 mL – menor custo; e é de fácil manipulação.

Algumas ações podem vir a melhorar o método FT-Raman – PLS. Sugere-se um estudo com amostras de gasolina contendo teores de etanol mais diferenciados entre si. Outra sugestão é otimizar o método cromatográfico (PONA) para aumentar o grau de confiabilidade dos valores de referência, já que ainda existem alguns picos sem identificação e quantificação precisa. Também se sugere aumentar o número de scans quando da obtenção dos espectros FT-Raman, para diminuir o nível de ruído, e fazer algum tratamento matemático nos espectros FT-Raman que venham a apresentar fluorescência para corrigir este efeito.