

Aplicação de EMSC em infravermelho próximo na determinação de açúcar em marzipan

Francisco dos Santos Panero^{1*}(PG), João dos Santos Panero¹(PG), Henrique Eduardo Bezerra da Silva²(PQ).

fspaneroit@yahoo.com.br

¹Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade Federal de Roraima (UFRR), Boa Vista – RR

²Departamento de Química, Universidade Federal de Roraima (UFRR), Boa Vista – RR..

Palavras Chave: EMSC, NIR, marzipan.

Introdução

Uma das principais fontes de erro encontradas em determinações quantitativas utilizando a espectroscopia no infravermelho próximo - NIR , é o fenômeno de espalhamento de luz, provocado pela não homogeneidade da amostra, principalmente pelas diferenças de granulométrica, geometria, embalagem e orientação das partículas, etc. Modelar, simultaneamente espalhamento de luz e medidas espectrais é uma tarefa extremamente difícil, pois a geometria e a orientação das partículas variam aleatoriamente, de amostra para amostra e o espalhamento de luz altera esta relação. Assim, na construção de modelos precisos e robustos, é necessário minimizar o efeito do espalhamento de luz. A correção de espalhamento de luz estendida, do inglês, Extended Multiplicative Signal Correction (EMSC) é a modificação da correção do espalhamento de luz (MSC)¹. A técnica EMSC foi desenvolvida por Martens e Stark, melhorando a robustez e habilidade de previsão na calibração multivariada². Este estudo demonstra a aplicação da técnica EMSC e suas combinações, em termos de robustez e habilidade de calibração e predição dos modelos de PLSR em espectroscopia no infravermelho próximo para a determinação de açúcar em marzipan.

Resultados e Discussão

A técnica de EMSC foi aplicada em espectros de infravermelho próximo de marzipan, e comparada com o espectro bruto (sem pré-tratamento) das amostras, com a primeira derivada (1ª D), segunda derivada (2ª D), SNV e MSC e suas combinações (1ª D + EMSC, 2ªD + EMSC, e vice-versa) em termos de robustez e habilidade de predição dos modelos de Regressão por Mínimos Quadrados Parciais - PLSR . Para a construção dos modelos de calibração e previsão foram utilizados os espectros NIRS (800-2100nm) de 32 amostras de marzipan em relação ao percentual de açúcar. Para avaliar a performance estatística dos modelos de PLSR na quantificação do percentual de açúcar em marzipan, utilizou-se a Validação Cruzada, para a calibração (RMSEC - root mean square error of cross validation) e previsão (RMSEP - root mean error

31ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

of prediction), o software utilizado tanto para a construção dos modelos de calibração e previsão quanto para a comparação das técnicas de pré-processamento de sinais foi o UNSCRAMBLER v9.2.

Tabela 1. Performance estatística dos modelos de calibração e previsão da Validação cruzada completa dos espectros NIRS de marzipan.

Processamento	Correlação		Erro de Predição (% açúcar)	
	Calibra.	Previs.	RMSEC	RMSEP
Espectro Bruto	0.987	0.977	2.021	2.696
1ª Derivada	0.992	0.985	1.612	2.250
2ª Derivada	0.993	0.970	1.493	3.137
SNV	0.982	0.976	2.364	2.782
MSC	0.983	0.976	2.357	2.774
EMSC	0.988	0.979	1.938	2.579
EMSC + 1ª D	0.994	0.990	1.341	1.779
1ª D + EMSC	0.994	0.986	1.392	2.120
EMSC + 2ª D	0.994	0.980	1.431	2.543
2ª D + EMSC	0.994	0.974	1.438	2.935

Conclusões

A técnica EMSC (Extended Multiplicative Signal Correction) e suas combinações obtiveram a melhor performance global em termos de habilidade de calibração e previsão. Demonstrando assim o seu excelente desempenho na correção de espalhamento de luz em espectroscopia no infravermelho próximo - NIRS.

Agradecimentos

CNPQ, FINEP e CAPES

¹ Decker, M. et al, Appl. Spectr. **2005**, 59, 68.

