

APS-ADL aplicada ao melhoramento da classificação de águas minerais pela intensidade de emissão medida em ICP-OES

Paulo Henrique G. D. Diniz^{1,*} (PG), Fernanda V. C. Vasconcelos¹ (PG), Wellington S. Lyra¹ (PG), Sherlan G. Lemos¹ (PQ), Mário C. U. Araújo¹ (PQ), Alexandre L. Souza (PG)², Pedro V. Oliveira (PQ)², Paulo R. M. Correia (PQ)³, Juliana Naozuka (PQ)⁴, Thiago R. L. C. Paixão (PQ)⁴

paulodiniz.quimica@gmail.com

¹ Departamento de Química, Universidade Federal da Paraíba, CP 5093, CEP 58051-970, João Pessoa, PB, Brasil.

² Instituto de Química, Universidade de São Paulo, CP 26077, CEP 05508-000, São Paulo, SP, Brasil

³ Escola de Artes, Ciências e Humanidades, Universidade de São Paulo, CEP 03828-000, São Paulo, SP, Brasil

⁴ Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC, CEP 09210-170, Santo André, SP, Brasil

Palavras Chave: classificação, águas minerais, ICP-OES, seleção de variáveis.

Introdução

A discriminação da origem geográfica de águas minerais por espectrometria de emissão ótica com fonte de plasma acoplado indutivamente (ICP-OES) tem sido proposta na literatura^{1,2}. A análise por ICP-OES permite determinar dezenas de elementos simultaneamente, gerando um grande volume de dados, justificando assim a utilização de ferramentas quimiométricas.

O presente trabalho tem como objetivo geral avaliar o emprego de métodos quimiométricos de reconhecimento de padrões para classificação de amostras de água mineral das regiões Sudeste e Sul do Brasil de acordo com o aquífero onde se encontra a fonte. Como objetivo específico pretende-se avaliar o emprego do algoritmo APS-ADL (Algoritmo das Projeções Sucessivas – Análise Discriminante Linear) no melhoramento das classificações empregando os métodos de reconhecimento de padrões supervisionados: K-Vizinhos mais Próximos (KNN) e Modelagem Independente e Flexível por Analogia de Classes (SIMCA).

Resultados e Discussão

Inicialmente foi realizado o pré-processamento dos dados utilizando o auto-escalamento seguido da aplicação do algoritmo APS-ADL na seleção das variáveis mais relevantes para a devida classificação das amostras. O APS-ADL selecionou 12 das 100 variáveis espectrais: Al (167.078), Mn (257.611), P (213.620), Cl (136.345), Al (309.271), Na (589.592), Sr (407.771), S (180.732), Mg (285.213), K (766.451), Ba (454.404) e Pb (168.215).

A figura 1 mostra o resultado da Análise de Componentes Principais (PCA) para o conjunto de dados pré-processados. São observados nove agrupamentos bem definidos e uma amostra anômala (outlier).

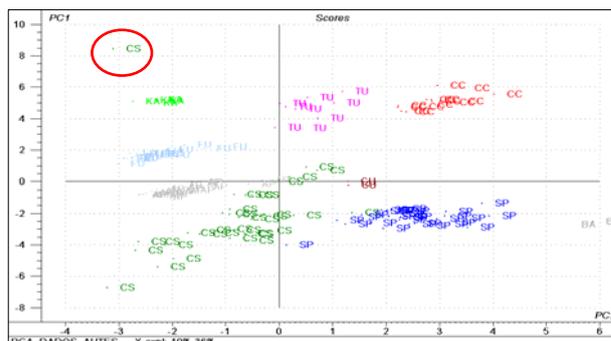


Figura 1. PCA aplicada ao conjunto de dados pré-processados.

A tabela 1 apresenta os resultados obtidos para o KNN e SIMCA com e sem¹ o emprego do APS-ADL. Houve uma melhora significativa no desempenho após a utilização do algoritmo empregado, uma vez que todas as amostras foram classificadas corretamente tanto para o KNN (K = 3) quanto para o SIMCA (P = 0,05).

Tabela 1 – Percentual de acertos na classificação das amostras sem e com emprego do APS-ADL.

Métodos	S/ APS-ADL	C/ APS-ADL
KNN	96%	100%
SIMCA	97%	100%

Conclusões

O emprego do APS-LDA para seleção de variáveis mostrou ser uma ferramenta eficaz no auxílio da classificação de amostras de águas minerais. A metodologia analítica empregando ICP-OES tem, portanto, poder para discriminar diferentes amostras de águas minerais, quando rotuladas segundo seus respectivos aquíferos.

Agradecimentos

CNPq, CAPES e UFPB.

¹ Souza, A. L. et al. Livro de resumos do 15º ENQA e 3º CIAQA, 2009.

² Silva, F. V. et. al., *Eclética Química*, 2002, 27, 1.