

Aplicação do modelo Tucker3 para análise dos dados CLAE-DAD de extratos brutos de *Erythrina speciosa* Andrews.

Patricia K. Soares¹ (PG) Ieda S. Scarminio² (PQ) e Roy E. Bruns¹ (PQ)* bruns@iqm.unicamp.br

1) Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, CP 6154, 13083-970, Campinas, SP, Brasil.

2) Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, CP 6001, 86051-990, Londrina, PR, Brasil.

Palavras Chave: Planejamento experimental, CLAE-DAD, Tucker3, *Erythrina speciosa*, multiway.

Introdução

Equipamentos como o cromatógrafo equipado com detector por arranjo de diodos geram dados de segunda ordem, ou seja, geram uma matriz de dados por amostra, permitindo que estas sejam analisadas por métodos multimodais. Os métodos mais utilizados são o Tucker3¹ e o PARAFAC¹. O objetivo deste trabalho foi interpretar os dados CLAE-DAD de segunda ordem com a aplicação do método Tucker3 para discriminar as amostras com relação às variáveis cromatográficas e espectroscópicas.

Resultados e Discussão

Os extratos brutos de *Erythrina speciosa* foram preparados com base em um planejamento experimental centróide simplex¹ com 4 componentes, etanol, diclorometano, hexano e acetona, resultando em 15 diferentes misturas de solventes. O ponto central foi feito em quintuplicata, totalizando 19 extratos. Os extratos foram analisados por CLAE usando como fase móvel uma mistura composta por água, metanol e acetonitrila na proporção de 65:17,5:17,5, o monitoramento dos cromatogramas foi feito no comprimento de onda de 210 nm. Para o tratamento dos dados foi montada uma matriz composta por 1200 valores de altura de pico (modo A), 256 valores de absorbância em função do comprimento de onda (modo B) e 19 amostras (modo C). Foram testados os modelos Tucker3 e PARAFAC, sendo que os melhores resultados foram obtidos com o método Tucker3. Um teste atribuindo 10 fatores para cada um dos modos mostrou através da avaliação das variâncias explicadas de cada uma das diferentes combinações dos modelos Tucker3, que seria adequado usar o modelo com um número total de 9 fatores, que corresponde à combinação 3:3:3, ou seja, um modelo contendo 3 fatores em cada um dos modos, este modelo permitiu explicar 97,72% da variância total. Das 27 combinações possíveis entre os fatores, foram avaliadas as três primeiras combinações que juntas permitiam explicar cerca de 98,6% da variância do core e mais uma que apesar de explicar somente 0,00002% da variância do core, foi importante na análise exploratória dos dados. A

34^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Tabela 1 apresenta as quatro combinações importantes junto com suas variâncias explicadas e seus valores de core.

Tabela 1. Elementos de core em ordem decrescente de variância de core para o modelo Tucker3 ajustado aos dados cromatográficos de *Erythrina*.

Ordem	Elemento do core	Core (10 ⁷)	Variância (%)
1	1 1 1	-12,20	94,85
2	2 2 2	-2,02	2,60
3	2 2 1	-1,34	1,14
4	2 3 1	-0,0059	0,00002

A primeira combinação revelou que as amostras contendo acetona em qualquer proporção na mistura extratora permitem extrair o pico com tempo de retenção em 3,69 min, e que este apresenta um espectro de absorção no UV com máximo no comprimento de onda de 260 nm

A segunda e a terceira combinação indicaram que as amostras contendo diclorometano em alguma proporção na mistura extratora permitem a extração do pico com tempo de retenção de 12,19 min e que este apresenta um espectro de absorção no UV com máximo em 201 nm.

Mesmo com pouca variância explicada, a quarta combinação permitiu relacionar as amostras contendo etanol em alguma proporção na mistura extratora com os picos com tempo de retenção em 2,73 e 4,07 min, sendo estes apresentaram espectros de absorção no UV com máximos nos comprimentos de onda de 199 e 268 nm e em 195, 220 e 281 nm, respectivamente.

Conclusões

A análise do modelo Tucker3 com um número total de 9 fatores aplicado aos dados tridimensionais de *Erythrina speciosa* Andrews permitiram discriminar as 19 amostras com relação aos solventes extratores acetona, diclorometano e etanol.

Agradecimentos

CNPq, FAPESP e Fundação Araucária.

¹ A. Smilde, R. Bro, P. Geladi: Multi-way analysis, John Wiley & Sons Ltda, New York, 2004.

² R. E. Bruns, B. Barros Neto, I. S. Scarminio: Statistical Design - Chemometrics. Elsevier, Amsterdam, 2006.