

Uso do algoritmo OPS[®] para selecionar variáveis interpretativas em espectros UV/VIS: melhoria da previsão de quatro corantes têxteis.

Priscylla R. Assis¹ (IC), Carlos J. da Silva¹ (IC), Efraim L. Reis¹ (PQ), César Reis¹ (PQ), Gilmare A. da Silva² (PQ), Carlos R. Bellato¹ (PQ), Reinaldo F. Teófilo¹ (PQ)*.

1. Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Química, Viçosa, MG, Brasil.

2. Universidade Federal de Ouro Preto, Departamento de Química, Ouro Preto, MG, Brasil. *rteofilo@gmail.com

Palavras Chave: corantes, seleção de variáveis, espectroscopia, calibração multivariada

Introdução

O mercado disponibiliza grande quantidade de diferentes tipos de corantes utilizados pela indústria têxtil [1]. Durante o processo de tingimento, aproximadamente 15% destes corantes são eliminados em efluentes industriais [2].

Na maioria dos casos é realizado o descarte de uma mistura de corantes e determinar suas concentrações individuais tornou-se um problema devido à sobreposição dos sinais analíticos. Como alternativa viável pode-se utilizar a espectroscopia na região do visível aliada à técnica de calibração multivariada. Embora os modelos de calibração multivariada tenham a capacidade de modelar os interferentes, muitas vezes a alta sobreposição espectral põe em risco a qualidade do modelo. Porém, métodos de seleção de variáveis podem e devem ser empregados para construir modelos mais preditivos e interpretativos.

O objetivo desse trabalho é utilizar o algoritmo de seleção dos preditores ordenados (OPS[®]) [3] para verificar sua capacidade em selecionar variáveis a partir de espectros UV/Vis de uma mistura de quatro corantes têxteis de modo a melhorar a capacidade de predição de modelos de calibração multivariada.

Resultados e Discussão

Quatro corantes têxteis, azul de bezathren (AB), alizarina (AL), vermelho direto (VD) e azul reativo (AR) foram misturados usando um planejamento fatorial parcial. Os níveis de concentração estudados para todos os corantes foram de 2,0 a 15 mg L⁻¹. Todas as soluções foram preparadas usando um tampão com pH 4,7. As amostras foram analisadas em um espectrofotômetro Cary 50 na faixa de 275 a 780 nm com intervalo de 0,1 nm. Os conjuntos de calibração e predição foram preparados com 30 e 9 amostras, respectivamente. Os espectros puros dos corantes apresentaram alta sobreposição.

A regressão por quadrados mínimos parciais (PLS) foi utilizada na construção dos modelos. O método OPS[®] foi empregado para seleção de variáveis [3].

A Figura 1 mostra as variáveis selecionadas para o vermelho direto. Observando seu espectro puro percebe-se que uma combinação de vetores informativos selecionou variáveis interpretativas e que são importantes para se obter boas previsões de sua concentração. Resultados similares foram

obtidos para os modelos dos outros corantes, indicando que tal algoritmo é bastante intuitivo.

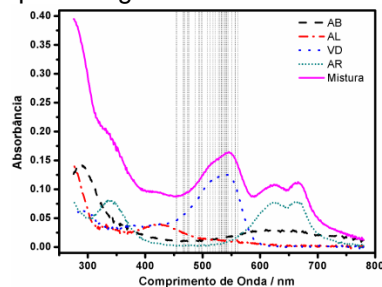


Figura 1. Espectros puros de cada corante, espectro da mistura e variáveis selecionadas para o VD.

A Tabela 1 mostra uma comparação entre os modelos construídos com todas as variáveis e o modelo com as variáveis selecionadas pelo OPS.

Tabela 1. Resultados estatísticos obtidos a partir de dados de UV/Vis para todos os corantes.

	Completo*		OPS†		Completo*		OPS†	
	AB	AL	VD	AR	AB	AL	VD	AR
Vector	-	R.N.	-	R.N.	-	R.C.S.N.	-	R.C.
hOPS	-	6	-	6	-	7	-	7
hMod.	5	4	5	5	5	5	5	5
nVars	506	60	506	163	506	78	506	105
RMSECV	0.543	0.399	0.165	0.129	0.064	0.052	0.153	0.107
R _{cv}	0.982	0.990	0.998	0.999	0.999	0.999	0.998	0.999
RMSEP	0.674	0.518	0.219	0.162	0.118	0.088	0.191	0.120
R _p	0.971	0.988	0.999	0.999	0.999	0.999	0.999	0.999

*Completo: espectro completo. † OPS: Seleção OPS. hOPS: número de variáveis latentes para o vetor de regressão utilizados na seleção. hMod.: número de variáveis latentes utilizadas no modelo. nVars: número de variáveis selecionadas. R.: vetor de regressão, N.: vetor Nas, C.: vetor de correlação, S.: vetor de resíduos.

Uma análise da Tabela 1 mostra que ocorreu melhorias significativas nas previsões e diminuição no número de variáveis originais para todos os modelos construídos, o que confirma a eficiência do método.

Conclusões

Aliar a regressão por PLS à seleção de variáveis usando o OPS[®] se mostrou uma alternativa adequada para se obter modelos com melhor capacidade preditiva e com número reduzido de variáveis interpretativas no problema analítico proposto.

Agradecimentos

FAPEMIG, CNPq e FUNARBE.

¹ Guaratini, C. C. I., Zanoni, M. V. B. *Química Nova*. 2000, 23, 71.

² Flox, C.; Ammar, S.; Arias, C.; Brillas, E.; Zavala, A. V. V.; Abdelhedi, R. *Applied Catalysis B: Environmental*. 2006, 67, 93.

³ Teófilo, R. F.; Martins, J. P. A.; Ferreira, M. M. C. *J. Chemometr.* 2008, 23, 32.