



E273

CALIBRAÇÃO MULTIVARIADA E ANÁLISE EXPLORATÓRIA DOS ISÔMEROS DO XILENO

Danilo Santos Ortiz (Bolsista PIBIC/CNPq) e Profa. Dra. Márcia Miguel Castro Ferreira (Orientadora), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Da necessidade de extrair as informações relevantes a um conjunto de dados, desenvolveu-se a quimiometria, nova área da química que utiliza a estatística multivariada na interpretação de dados. Este trabalho dedicou-se ao estudo da quimiometria, pela sua aplicação e interpretação, sendo que este estudo se deu da seguinte forma: simulação de misturas dos isômeros do xileno utilizando planejamento fatorial, elaborando as matrizes de dados de espectros de massas dos compostos em estudo extraídos de bancos de dados, construção e comparação de modelos de calibração multivariada (NIPALSPLS, SIMPLS, PCR) na determinação do teor dos compostos em misturas simuladas. Os modelos portaram-se bem, separando os isômeros, antes não separados pela espectroscopia de massas e fazendo previsões para novos conjuntos de dados, assim como a análise exploratória, que pode ser usada tanto na separação de padrões quanto na identificação de outlier. Conclui-se que os métodos quimiométricos são em geral boas ferramentas de análise, uma vez que, análises antes impossível tornaram-se possíveis com estes métodos. Contudo esta deve ser mantida em estudos, uma vez que alguns algoritmos utilizados não foram totalmente entendidos, como o PLS.

Calibração Multivariada - Análise Exploratória - Simulação