



E0533

PREDIÇÃO DA CONCENTRAÇÃO DE COMPONENTES VIA TÉCNICAS NÃO PARAMÉTRICAS COM APLICAÇÃO EM CIÊNCIA FORENSE

Alex Rodrigo dos Santos Sousa (Bolsista PIBIC/CNPq) e Profa. Dra. Nancy Lopes Garcia (Orientadora), Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica - IMECC, UNICAMP

O problema de estimar as concentrações dos constituintes de uma dada substância é bastante comum em Quimiometria. Dentre os diversos métodos utilizados para esta finalidade, tem-se a espectroscopia de infravermelho. Neste método, obtém-se uma variedade de sinais, os espectros, que são associados às concentrações através das absorvâncias de cada constituinte através de um modelo matemático baseado na Lei de Beer-Lambert. Para a utilização de tal modelo, faz-se necessária a estimação de uma quantidade de parâmetros, processo denominado de calibração. Geralmente, esta calibração é feita através de técnicas multivariadas. Entretanto, tais técnicas desconsideram a natureza funcional dos dados, o que pode provocar certos problemas operacionais devido à dimensão destes. Assim, este trabalho propõe o uso de técnicas não paramétricas para o processo de calibração do modelo, via ajuste de curvas por splines e utiliza este processo para predizer as concentrações de novas amostras de substâncias. Esta metodologia é aplicada em três conjuntos de dados e comparada com uma metodologia de calibração multivariada. Conclui-se que a técnica proposta apresenta resultados tão satisfatórios quanto a já existente, porém requer a estimação de uma quantidade significativamente menor de parâmetros.

Predição - Não paramétrico - Forense