

Tutorial para aplicação de Quimiometria em software gratuito: PCA-DA aplicado em dados de ICP-MS.

*Anna C. M. Soares¹ (IC), Alyson T. De Barros¹ (PG), Madson Z. Poltronieri¹ (PG), Tayná De O. Costa² (PG), Murilo De. O. Souza² (PQ), Paulo R. Filgueiras¹ (PQ).

*annaclaramutzsoares@gmail.com

¹Departamento de Química, Universidade Federal do Espírito Santo, Av. Fernando Ferrari, 514 - Goiabeiras, Vitória - ES, 29075-910, Brasil.

²Laboratório de Analítica, Metabolômica e Quimiometria (LAMEQui), Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Espírito Santo, Campus Alegre (IFES), Brasil.

Palavras Chave: Quimiometria, Tutorial, Classificação, GNU Octave.

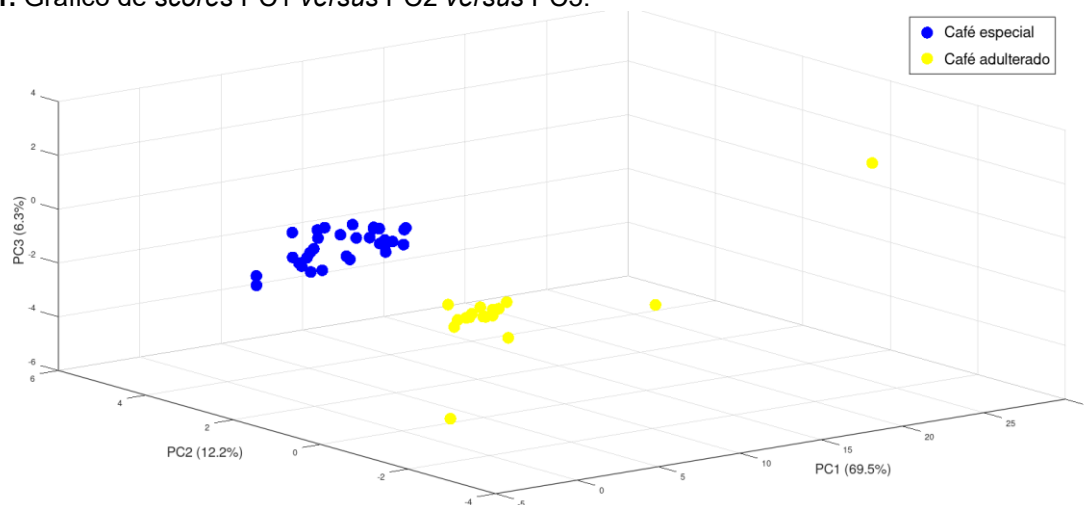
Introdução

A Quimiometria no Brasil apresenta sólida produção científica e formação de novos pesquisadores, mas ainda carece de materiais didáticos em português, especialmente voltados à graduação¹. Este trabalho propõe um tutorial para aplicação da Análise Discriminante de Componentes Principais (PCA-DA), utilizando o software gratuito GNU Octave. O objetivo é desenvolver metodologias com abordagem didática, contribuindo para o ensino da Quimiometria e estimulando o interesse dos estudantes, suprimindo lacunas na formação prática e teórica nessa importante área do conhecimento.

Resultados e Discussão

O trabalho utilizou o software GNU Octave para desenvolver algoritmos aplicados a dados de ICP-MS de amostras de café especial e de café adulterado com grãos de baixa qualidade. A figura 1 apresenta os scores da PCA-DA desenvolvida para visualizar a distribuição e agrupamento das amostras, onde maior variabilidade implica maior afastamento no gráfico². Destaca-se, ainda, a importância de métodos didáticos em Quimiometria para tornar o ensino mais acessível no curso de Química.

Figura 1. Gráfico de scores PC1 versus PC2 versus PC3.



Nesse sentido, o tutorial ainda está em desenvolvimento, assim como sua aplicação em ambientes educacionais. Futuramente, será testado em contextos reais de ensino para avaliar sua eficácia na aprendizagem da Quimiometria.

Conclusões

O tutorial de PCA-DA com GNU Octave oferece alternativa acessível e didática, promovendo a difusão da Quimiometria em instituições de ensino e diferentes níveis acadêmicos.

Agradecimentos

FAPES; CAPES; CNPQ; PRH-ANP 53.1 UFES.

¹ L. T. M. Guedes; L. S. M. Soares; S. L. Neves e G. M. K. Lima. *Quim. Nova* **36**, 480, 2013

² T. de O. Costa; J. R. Botelho; M. H. C. Nascimento; M. Krause; M. T. W. D. Carneiro; D. C. Ferreira; P. R. Filgueiras; M. de O. Souza. *Food Chem.* **442**, 2024.