

CLASSIFICAÇÃO DAS ÁGUAS DO CÓRREGO PARAGEM EMPREGANDO QUIMIOMETRIA E ESPECTROFOTOMETRIA: UM ESTUDO PRELIMINAR

Ediléia Amancio Da Silva (edileia.amancio@hotmail.com)

Heberth Juliano Vieira (heberthvieira@ufgd.edu.br)

A análise de componentes principais (PCA) é uma técnica de análise multivariada que utiliza combinações de dados originais, resultado em um novo conjunto de variáveis, as componentes principais (CP), que possibilitam a representação espacial dos dados com a finalidade da classificação destes dados. As primeiras componentes principais explicam a maior parte da variância total contida no conjunto de dados e podem ser usadas para representá-lo. O objetivo deste trabalho foi classificar as amostras de águas coletadas em diferentes pontos de amostragem do córrego Paragem, na cidade de Dourados/MS, empregando a espectrofotometria molecular. Os espectros de absorção das soluções de amostras filtradas foram obtidos empregando espectrofotômetro Cary 50 (Agilent Technologies), cubeta de quartzo com 4 faces polidas, entre os comprimentos de onda de 210 a 400 nm, com $\Delta\lambda$ de 0,5 nm. As amostras foram coletadas em 04 diferentes pontos do corpo d'água: Nascente; Palmeiras; Aguiar e Frei Antônio. Os espectros de absorção molecular obtidos foram analisados utilizando o software PAlaeontological SStatitics, versão 3.20. Dos pré-processamentos avaliados, nenhum apresentou desempenho razoável na classificação dos pontos de amostragem. O uso dos dados de absorbância vs. comprimento de onda permitiu notar uma separação entre os pontos de amostragem em 03 grupos distintos. A separação verificada se correlaciona de acordo com a intensidade de ocupação ao longo do corpo d'água. Realizando a análise de componentes principais (PCA) foi verificado que as componentes CP1 e CP2 descreveram 97,9% da variação total dos dados e fornecem informações discriminatórias dos pontos de amostragem analisados. Sendo que a primeira componente principal (CP1) descreve 95,73% da variação total, 2,18% da variação total dos dados é descrita pela segunda componente principal (CP2). A análise de componentes principal foi uma ferramenta quimiométrica que permitiu o emprego da espectrofotometria de absorção molecular, que é uma técnica simples e robusta, para a classificação dos pontos de amostragem de acordo com a urbanização da região estudada