

# DISCRIMINAÇÃO GEOGRÁFICA DE ÁGUAS MINERAIS DO ESTADO DE SÃO PAULO ATRAVÉS DA ANÁLISE MULTIVARIADA

*Fernando V. Silva (PG)<sup>1,2</sup>, Marcos Y. Kamogawa (PG)<sup>1,2</sup>, Márcia M. C. Ferreira (PQ)<sup>3</sup>, Joaquim A. Nóbrega (PQ)<sup>2</sup>, Ana Rita A. Nogueira (PQ)<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Embrapa Pecuária Sudeste, Caixa Postal 339, 13560-970 São Carlos SP

<sup>2</sup>Grupo de Análise Instrumental Aplicada (GAIA), Departamento de Química  
Universidade Federal de São Carlos, São Carlos SP

<sup>3</sup>Universidade Estadual de Campinas, Campinas SP

*Palavras-chave: análise multivariada, PCA, HCA*

O avanço instrumental das técnicas analíticas proporcionou a obtenção de um maior volume de resultados e consequentemente, exigiu estratégias mais complexas para interpretação dos dados experimentais. A análise multivariada surgiu como uma importante ferramenta no tratamento desses dados permitindo a extração de uma quantidade maior de informação. Fatores climatológicos, geológicos, antrópicos e outros, devem ser considerados quando se aplica a análise multivariada, pois a avaliação conjunta dessas variáveis gerará informações difíceis de serem obtidas univariavelmente.

A presença de elementos dissolvidos em águas minerais é um dos principais fatores de caracterização da amostra, sendo que a composição da água está diretamente relacionada ao tipo de solo em que a fonte se origina. A partir da análise dos metais presentes na água mineral é possível correlacionar e agrupar as fontes por semelhança de sua composição química, caracterizar a origem da amostra e agrupar as fontes pelo seu posicionamento geográfico ou sua bacia hidrográfica.

O objetivo desse trabalho foi discriminar amostras de águas minerais quanto a sua origem geográfica utilizando a análise multivariada (PCA - Análise por Componentes Principais e HCA - Análise Hierárquica de Clusters) como ferramenta analítica. Amostras provenientes de 13 fontes hidrominerais do estado de São Paulo e com distintas datas de envasamento foram adquiridas no comércio sendo sua composição química inorgânica (Ba, Ca, K, Mg, Na e V) determinada usando um espectrômetro de emissão ótica com plasma induzido (ICP-OES). Medidas de pH também foram realizadas.

Os resultados foram analisados empregando programa estatístico Pirouette 3.0 (Infometrix, Seattle, EUA). Após a análise de PCA e HCA, foi constatado que as amostras de águas minerais se agrupavam em 5 diferentes grupos de acordo com sua localização geográfica. Considerando a mesma fonte hidromineral em distintas datas de envasamento, verificou-se que sua composição química permanecia constante, podendo ser utilizada como um parâmetro discriminativo de sua origem. Os agrupamentos observados foram devidos à similaridade das amostras analisadas neste experimento. A aplicação da análise multivariada forneceu resultados úteis que podem ser utilizados para detecção de adulteração ou contaminação da amostra.

[FAPESP, CAPES, EMBRAPA]