

## Métodos híbridos: uma ferramenta para calibração multivariada

Pedro Augusto de Oliveira Morais<sup>1</sup>, Diego Mendes de Souza<sup>2</sup>, Beata Eموke Madari<sup>3</sup>

No cenário atual de (i) contingenciamento de gastos, e (ii) aumento expressivo de demanda de ensaios; busca-se desenvolver métodos analíticos alternativos mais limpos, baratos e operacionais. As espectroscopias no infravermelho médio (MIR) e próximo (NIR) têm somado inúmeros resultados satisfatórios na predição quantitativa de parâmetros do solo, quando associadas a calibrações multivariadas. Regressão linear múltipla (MLR); e mínimos quadrados parciais (PLS) são os métodos de calibração multivariados mais utilizados e pressupõe relação linear entre os sinais instrumentais e a concentração do analito. Entretanto, para algumas aplicações com conjunto amostral e faixa de concentração diversificada são necessários métodos de regressão não lineares para melhores ajustes. A máquina de vetor de suporte com mínimos quadrados (LS-SVM) têm se mostrado a ferramenta mais promissora na resolução de problemas multivariados não lineares. Devida a alternância de métodos de acordo com as especificidades das aplicações, pode haver possibilidade de incremento significativo caso sejam desenvolvidos modelos multivariados híbridos. Desenvolver novas ferramentas de ajuste de calibração multivariada através da hibridização de métodos clássicos (MLR, PLS e LS-SVM) que apresente desempenho superior às técnicas individuais. Considerou-se para calibração multivariada uma coleção brasileira de 1173 amostras de solo, correlacionando espectros MIR e teor de nitrogênio total (NT). A varredura espectral na região MIR foi realizada com espectrômetro, utilizando a região espectral 4000 a 400  $\text{cm}^{-1}$  (MID-IR). As novas ferramentas foram desenvolvidas em ambiente MATLAB com automatização na geração de parâmetros de qualidade em tabelas e gráficos de calibração". Os modelos MLR e PLS apresentaram os piores resultados entre 8 modelos comparados. Isso pode ser explicado por desvios da linearidade na região do infravermelho que pode ser causada por espalhamento da luz, interações moleculares e altas concentrações do analito. O modelo por LS-SVM apresentou melhora significativa na predição de NT frente à MLR e PLS, isso porque, já se conhece que essa ferramenta apresenta alta capacidade de modelagem não linear. Todos os 5 modelos híbridos propostos apresentaram erros de calibração e validação menores que os apresentados pelos modelos individuais. Os resultados desse estudo demonstram que houve sinergismo entre os métodos clássicos, pois os métodos híbridos apresentaram melhores predições de NT.

<sup>1</sup> Estudante de pós-graduação em Química da Universidade Federal de Goiás, estagiário da Embrapa Arroz e Feijão, Santo Antônio de Goiás, GO, pedro\_augusto\_04@hotmail.com

<sup>2</sup> Químico, MSc. em Química, analista da Embrapa Arroz e Feijão, Santo Antônio de Goiás, GO, diego.souza@embrapa.br

<sup>3</sup> Engenheira agrônoma, Ph.D. em Ciência do Solo e Nutrição de Plantas, pesquisadora da Embrapa Arroz e Feijão, Santo Antônio de Goiás, GO, beata.madari@embrapa.br