

SP 05: Quimiometria – QM

QM.1 (TR 735)

Planejamento mistura-processo e modelagem da área total cromatográfica dos extratos brutos de *Erythrina speciosa* Andrews

Patrícia K. Soares¹, João A. Bortoloti², Ieda S. Scarminio³, Roy E. Bruns¹

¹Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil; ²ESAMC, Campinas, SP, Brasil; ³Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, Londrina, PR, Brasil.

QM.2 (TR 228)

Resolvendo problemas de efeito de matriz em análise de fármacos por fluorescência de sólidos utilizando transferência de calibração

Julio Cesar L. Alves, Ronei J. Poppi

Laboratório de Quimiometria em Química Analítica, Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil

QM.3 (TR 229)

Determinação de densidade diretamente em cavacos de madeira com espectroscopia no infravermelho próximo e calibração multivariada

Laura B.L.R. Nascimbem¹, Bibiana R. Rubini², Ronei J. Poppi¹

¹Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil; ²Aracruz Celulose SA, Centro de Pesquisa e Tecnologia, Aracruz, ES, Brasil

QM.4 (TR 231)

Mínimos quadrados parciais multimodo por intervalos (iNPLS) para quantificação de alergênicos em perfume utilizando GCxGC

Luiz A.F. de Godoy Jr., Márcio P. Pedroso, Ernesto C. Ferreira, Fabio Augusto, Ronei J. Poppi

Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil

QM.5 (TR 232)

Calibração multivariada e espectroscopia molecular na quantificação de enantiômeros do propranolol

Patrícia Valderrama, Laura Nascimbem, Ronei J. Poppi

Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil

QM.6 (TR 233)

Determinação do teor de amilose em amidos utilizando espectroscopia raman e calibração multivariada

Mariana R. Almeida¹, Rafael S. Alves¹, Laura B.L.R. Nascimbem², Rodrigo Stephani³, Ronei J. Poppi², Luiz F.C. de Oliveira¹

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, MG, Brasil;

²Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil; ³Gemacom Comércio e Serviços LTDA, Juiz de Fora, MG, Brasil

QM.7 (TR 234)

Identificação de espécies vegetais do gênero Aniba por Análise de Componentes Principais (PCA) aplicada a dados cromatográficos

Luiz A.F. de Godoy Jr., Rita de Cassia Z. de Souza, Lauro E.S. Barata, Fabio Augusto, Ronei J. Poppi

Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil

QM.8 (TR 235)

Otimização multivariada na análise de compostos voláteis em charuto por HS-SPME e GC-MS

Vanessa de M. Prata, Elissandro S. Emídio, Sandro Navickiene, Haroldo S. Dórea

Departamento de Química, Universidade Federal de Sergipe, São Cristóvão, SE, Brasil

QM.9 (TR 237)

Otimização de procedimento para extração de metais em rações usando energia de ultra-som e determinação por FAAS

Joélia M. Barros, Gisseli S. Valasques, Moisés A. Lima Neto, Marcos de A. Bezerra

Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Jequié, Bahia, Brasil

SP 05: Quimiometria – QM

QM.10 (TR 238)

Emprego da análise dos fatores paralelos (PARAFAC) e da espectrofluorimetria no estudo da estabilidade do iogurte

Giselle L. Silva¹, Arnaldo P. Silva¹, Cristiane A. Henriques¹, Aderval S. Luna¹, Jez W.B. Braga²

¹Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil; ²Universidade de Brasília, Brasília, DF, Brasil

QM.11 (TR 239)

Utilização de histogramas de imagens para verificação da qualidade de leite bovino

Poliana M. dos Santos, Edenir R. Pereira Filho

Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP, Brasil

QM.12 (TR 240)

Cartas de controle multivariadas e espectroscopia no infravermelho próximo para o controle de qualidade em medicamento

Wérickson F.C. Rocha, Ronei J. Poppi

Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil

QM.13 (TR 241)

Aplicação de MCR-ALS e análise por injeção em fluxo no cálculo de constantes aparentes de equilíbrio de antocianinas.

Paulo H. Março, Werickson R.F. Rocha, Ronei J. Poppi

Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil

QM.14 (TR 243)

Resolução multivariada de curvas: aplicação em espectroscopia de imagens hiperespectrais.

Guilherme P. Sabin, Ronei J. Poppi

Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil

QM.15 (TR 244)

Emprego da espectrofluorimetria e PARAFAC na determinação de levofloxacinó em amostras de urina
Thais M.S. Costa¹, Arnaldo P. Silva¹, Aderval S. Luna¹, Ricard B. Martí², Joan F. Baldrich², Ricardo Q. Aucélio³, Jez W.B. Braga⁴

¹Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil; ²Departamento de Química Analítica i Química Orgânica, Universitat Rovira i Virgili, Tarragona, Espanha; ³Departamento de Química, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro; Rio de Janeiro, RJ, Brasil; ⁴Departamento de Química, Universidade de Brasília, Brasília, DF, Brasil

QM.16 (TR 245)

Aplicação da espectrofluorescência na determinação de levofloxacinó em medicamentos

Thais M.S. Costa¹, Arnaldo P. Silva¹, Aderval S. Luna¹, Ricard B. Martí², Joan F. Baldrich², Ricardo Q. Aucélio³, Jez W.B. Braga⁴

¹Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil; ²Departamento de Química Analítica i Química Orgânica, Universitat Rovira i Virgili, Tarragona, Espanha; ³Departamento de Química, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro; Rio de Janeiro, RJ, Brasil; ⁴Departamento de Química, Universidade de Brasília, Brasília, DF, Brasil

QM.17 (TR 247)

Aplicação da regressão por LS-SVM na quantificação de biodiesel em blends biodiesel/diesel usando espectros ATR-FTIR.

Márcia Werlang¹, Mariela S. Viera¹, Daniela Fachini², Rubén E.P. Pazos¹, Marco F. Ferrão¹, Annelise E. Gerbase², Rosana C.S. Schneider¹

¹Universidade de Santa Cruz do Sul, Santa Cruz do Sul, RS, Brasil; ²Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil

SP 05: Quimiometria – QM

QM.18 (TR 248)

Emprego de titulação potenciométrica e ferramentas quimiométricas para determinação de constituintes em amostras de silagem

Rodolfo Carapelli^{1,2}, Caio F. Gromboni^{1,2}, Gilberto B. de Souza¹, Ari Luiz de Castro³, Paulo H.M. Rodrigues³, Francisco P. Rennó³, Ana Rita de A. Nogueira¹

¹Embrapa Pecuária Sudeste, São Carlos, SP, Brasil; ²Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP, Brasil; ³Faculdade de Medicina Veterinária e Zootecnia, Universidade de São Paulo, Pirassununga, SP, Brasil.

QM.19 (TR 249)

Avaliação da incerteza na determinação de fluoreno em misturas de HPAs por espectrofluorescência e PARAFAC

Igor C.A. Lima¹, Aderval S. Luna¹, Ricard B. Martí², Joan F. Baldrich², Jez W.B. Braga³

¹Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil; ²Departamento de Química Analítica i Química Orgânica, Universitat Rovira i Virgili, Tarragona, Espanha; ³Departamento de Química, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil; ⁴Departamento de Química, Universidade de Brasília, Brasília, DF, Brasil

QM.20 (TR 250)

Uso da calibração multivariada de 2ª. ordem na espectrofluorimetria para a determinação simultânea de naftaleno e fenantreno

Igor C.A. Lima¹, Aderval S. Luna¹, Ricard B. Martí², Joan F. Baldrich², Jez W.B. Braga³

¹Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil; ²Departamento de Química Analítica i Química Orgânica, Universitat Rovira i Virgili, Tarragona, Espanha; ³Departamento de Química, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil; ⁴Departamento de Química, Universidade de Brasília, Brasília, DF, Brasil

QM.21 (TR 252)

Método otimizado de determinação de nitritos em águas a partir de diferentes procedimentos

Wellington da S. Lyra, Francisco A. da Silva Cunha, Wallace D. Fragoso

Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, PB, Brasil

QM.22 (TR 736)

Otimização multivariada do programa de temperatura para determinação de cobre em óleos minerais isolantes utilizando GFAAS.

Luiz Fernando S. Caldas¹, Ricardo J. Cassella²

¹IFRJ, Nilópolis, RJ, Brasil; ²Universidade Federal Fluminense, RJ, Brasil

QM.23 (TR 738)

Determinação da seletividade em modelos UPLS/RBL em situações onde a vantagem de segunda-ordem é empregada.

Jez W.B. Braga, Renato L. Carneiro, Ronei J. Poppi

Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil

QM.24 (TR 739)

Estimativa dos intervalos de confiança para determinações com UPLS/RBL empregando a vantagem de segunda-ordem.

Jez W.B. Braga, Renato L. Carneiro, Ronei J. Poppi

Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas,, SP, Brasil

QM.25 (TR 740)

Estimativa do pKa do trans-resveratrol usando espectrofluorimetria e PARAFAC

Cristina D. Bernardes¹, Ronei J. Poppi², Marcelo M. Sena¹

¹UnUCET, Universidade Estadual de Goiás, Anápolis, GO, Brasil; ²Laboratório de Quimiometria em Química Analítica, Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil

SP 05: Quimiometria – QM

QM.26 (TR 741)

Previsão da tensão interfacial de óleos isolantes usando análise de imagens e métodos de calibração multidimensional

Mariana da S. Godinho¹, Maykon A. Lemes¹, Anselmo E. de Oliveira², Marcelo M. Sena¹

¹UnUCET, Universidade Estadual de Goiás, Anápolis, GO, Brasil; ²Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, GO, Brasil

QM.27 (TR 742)

Toolbox caliBRA-Q: Uma ferramenta para calibração multivariada não-linear derivada do PLS

Wallace Duarte Fragoso¹

Universidade Federal da Paraíba, Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Depto. de Química, João Pessoa, PB, Brasil

QM.28 (TR 744)

Uso de PCA na classificação de palmitos do Estado do Pará a partir dos teores de Cu, Fe e Zn

Antonio dos S. Silva^{1,2}, Ewerton C. de Souza¹, Victor W.B. Diniz¹, Regina C. Sarkis Müller², Heronides A. Dantas Filho¹, Kelly G. Fernandes¹

¹Grupo de Espectrometria Analítica Aplicada, Faculdade de Química, Instituto de Ciências Exatas e Naturais, Universidade Federal do Pará, Belém, PA, Brasil; ²Laboratório de Controle de Qualidade e Meio Ambiente, Faculdade de Química, Instituto de Ciências Exatas e Naturais, Universidade Federal do Pará, Belém, PA, Brasil

QM.29 (TR 745)

Utilização de métodos de análise exploratória na classificação de óleos de oliva extra-virgem adulterados com óleos vegetais, analisados por FT-IR

Rosilene S. Nascimento¹, Rodrigo S. de Oliveira², Cláudio L. Donnici¹, Waldomiro B.

Neto², José Bento B. da Silva¹

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, Brasil;

²Departamento de Química, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, Brasil.

QM.30 (TR 746)

Utilização de cartas de controle multivariado no monitoramento de nutrientes em solo *in situ*

Wallace D. Fragoso¹, Sherlan G. Lemos¹, Silmara R. Bianchi^{2,3}, Ana R.A. Nogueira^{2,3}, Adônis Moreira³, Gilberto B. Sousa³

¹Departamento de Química, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, PB, Brasil; ²Grupo de Análise Instrumental Aplicada, Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP, Brasil; ³Embrapa Pecuária Sudeste, São Carlos, SP, Brasil.

QM.31 (TR 747)

Determinação da resistência à tração do PET usando espectroscopia no infravermelho médio por transmissão e modelos PLS e MLR-SPA

Viviane F. Caetano¹, Simone da S. Simões¹, Mario Cesar U. de Araújo², Maria Fernanda Pimentel¹, Glória Maria Vinhas¹

¹Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE, Brasil;

²Departamento de Química, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, PB, Brasil

QM.32 (TR 760)

Aplicação das cartas de controle multivariada para controle de qualidade de laboratório de caracterização de petróleos

Cristina M.S. Sad¹, Paulo R. Filgueiras¹, Maristela A. Vicente¹, Eustáquio V.R. Castro¹, Júlio C.M. Dias²

¹Universidade Federal do Espírito Santo, Departamento de Química, Laboratório de Pesquisa e Desenvolvimento de Metodologias para a Análises de Petróleos, Vitória, ES, Brasil;

²CENPES/PETROBRAS, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

SP 05: Quimiometria – QM

QM.33 (TR 748)

Incerteza de medição associada às medições de luminescência: estudo de caso em medicamento anticâncer

Priscila M.S Maia, Flávia F.C. Marques, Alessandra L.M.C. Cunha, Ricardo Q. Aucélio

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Laboratório de Espectroanalítica e Eletroanalítica Aplicada, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

QM.34 (TR 750)

Utilização da quimiometria para identificação de petróleos através da análise do infravermelho de suas frações

Mariana F.B. Mota¹, Majorie M. Malacarne¹, Paulo R. Filgueiras¹, Eustáquio V.R. de Castro¹, Reginaldo B. dos Santos¹, Lílian C. Medina²

¹*Universidade Federal do Espírito Santo, Departamento de Química, Vitória, ES, Brasil;* ²*CENPES, Petrobras, Rio de Janeiro, RJ, Brasil*

QM.35 (TR 751)

Uso de fluorescência de raios-X por dispersão de energia aliada a quimiometria na calibração dos teores de água e álcool em amostras de cachaça

Márcia P.R. Melo¹, Márcia M.C. Ferreira¹, Maria Izabel M.S.Bueno¹, Celina M. Henrique²

¹*Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil;* ²*APTA Regional Centro Sul, SAA, Piracicaba, SP, Brasil*

QM.36 (TR 753)

Análise do desempenho computacional e da exatidão de cinco algoritmos PLS usando planejamento quadrado latino

Reinaldo F. Teófilo¹; João Paulo A. Martins²; Márcia M.C. Ferreira²

¹*Departamento de Química, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, MG, Brasil;* ²*Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil.*

QM.37 (TR 754)

Identificação de fontes de antocianinas a partir de dados de cromatografia líquida de alta eficiência com tratamento quimiométrico.

Martha Maria Andreotti Favaro, Adriana Vitorino Rossi

Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil.

QM.38 (TR 755)

Estudo de adulteração de óleo de Oliva extra-virgem com oliva puro utilizando MIR e análise exploratória

Rosilene S. Nascimento¹, Cláudio L. Donnici¹, Waldomiro B. Neto², José Bento B. da Silva¹

¹*Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, Brasil;*

²*Departamento de Química, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, Brasil*

QM.39 (TR 756)

Avaliação do perfil de contaminação por cobre da sub-bacia do ribeirão São Bartolomeu utilizando PCA.

Rita A.D. Fonseca¹, Gilmar A. da Silva², Efraim L. Reis¹, César Reis¹, Reinaldo F. Teófilo¹, Luis E. do Nascimento¹, Lívia V. Leite¹

¹*Departamento de Química, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, MG, Brasil;* ²*Instituto de Ciências Exatas e Biológicas, Departamento de Química, Universidade Federal de Ouro Preto, Ouro Preto, MG, Brasil*

SP 05: Quimiometria – QM

QM.40 (TR 757)

Estudo do perfil de contaminação de leite materno com bifenilas policloradas em diferentes regiões brasileiras.

Cláudia H. Kowalski¹, Gilmar A. da Silva², Helena T. Godoy¹, Ronei J. Poppi³, Fabio Augusto³

¹Laboratório Nacional do Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento, São Paulo, SP, Brasil;

²Instituto de Ciências Exatas e Biológicas, Departamento de Química, Universidade Federal de Ouro Preto, Ouro Preto, MG, Brasil; ³Instituto de Química, Universidade Federal de Campinas, SP, Brasil

QM.41 (TR 758)

Análise exploratória de óleos vegetais empregando RMN ¹H de baixo campo e quimiometria

Patrícia R. Pê¹, Clebia P. França¹, Thaise D.A. Xavier², João P. Saraiva², Everaldo P. Medeiros²

¹Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, PB, Brasil; ²Embrapa Algodão (CNPQ), Brasil

QM. 42 (TR 262)

Desenvolvimento de método para determinação de sulfeto empregando sistema FIA com tratamento de amostra “on line”

Giovana F. Lima, Ariadne Brondi, Ana Lúcia C Paiva, César R.T. Tarley, Pedro O. Luccas

Departamento de Ciências Exatas, Universidade Federal de Alfenas, Alfenas, MG, Brasil

QM 43 (TR 253)

Uso do planejamento Plackett-Burman (PPB) para otimização da separação de ácidos orgânicos por eletroforese capilar (CE)

Fernando A.S. Vaz¹, Marcone A.L. de Oliveira¹, Thiago Caon², Gustavo A. Micke², Ana C. O. Costa³

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, MG, Brasil;

²Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Santa Catarina, SC, Brasil;

³Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, Universidade de São Paulo, São Paulo, SP, Brasil.

QM. 44 (TR 759)

Aplicação de planejamento fatorial na avaliação dos parâmetros envolvidos na extração de pesticidas por SDME

Anselmo de S. Pinheiro^{1,2}, Jailson B. de Andrade¹

¹Universidade Federal da Bahia, Instituto de Química, Salvador, BA, Brasil; ²Universidade Federal de Sergipe, Departamento de Engenharia Química, SE, Brasil.