

Chemometrics in Atomic Spectrometry: Common pitfalls and misapplication in scientific practice

Prof. Dr. Aderval S. Luna

Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ) – Programa de Pós-graduação em Engenharia Química (PPG-EQ), Rua São Francisco Xavier, 524 – PHLC Sala 400, Maracanã – Rio de Janeiro, RJ – CEP: 20550-900

Esta palestra apresenta uma análise crítica do uso da quimiometria na espectrometria atômica, com foco na identificação de erros metodológicos frequentes e de interpretações inadequadas que comprometem a validade científica de muitos estudos experimentais. A partir de exemplos reais extraídos da literatura e de práticas acadêmicas, são discutidos casos clássicos de calibração superajustada, de planejamento experimental deficiente e do uso incorreto de métodos estatísticos e multivariados, como a Análise de Componentes Principais (PCA). Esses exemplos evidenciam que modelos com elevado desempenho aparente, como altos valores do coeficiente de determinação, podem refletir apenas o ajuste ao ruído experimental, conduzindo a conclusões enganosas e baixa capacidade preditiva.

A palestra enfatiza a importância do planejamento experimental robusto como etapa fundamental em estudos espectrométricos, abordando conceitos essenciais, como a definição de fatores e respostas, a seleção de desenhos experimentais adequados e a aplicação correta de métodos fatoriais completos e fracionados, superfícies de resposta e critérios de otimização. São discutidas estratégias clássicas e modernas de otimização, incluindo métodos sequenciais, simplex, de subida mais íngreme e abordagens multicritério baseadas em funções de desejabilidade.

Além disso, a palestra explora de forma didática os fundamentos da regressão linear, destacando suas hipóteses estatísticas — linearidade, independência, homocedasticidade, normalidade e média zero dos resíduos — e as consequências de sua violação. Exemplos baseados nos conjuntos de dados de Anscombe ilustram como modelos estatisticamente semelhantes podem representar realidades completamente distintas ao serem analisados graficamente.

Por fim, a palestra reforça a necessidade de validação adequada dos modelos quimiométricos, do uso criterioso de ferramentas computacionais e de uma interpretação estatística rigorosa dos resultados. O objetivo central é capacitar pesquisadores e estudantes a reconhecer práticas inadequadas, evitar erros recorrentes e desenvolver análises mais confiáveis e cientificamente robustas em aplicações de quimiometria e de espectrometria atômica.