
USO DA REGRESSÃO LINEAR MÚLTIPLA COMBINADA COM ADIÇÃO DE PADRÃO (MLR-SA) E ANÁLISE EXPLORATÓRIA DE IMAGENS DIGITAIS NA AVALIAÇÃO DO PERFIL FÉRRICO EM INFUSÕES DE PLANTAS MEDICINAIS

Bruno E. S. Costa^{a,*}, Wallace H. C. Peres^a, James M. Silva^a, Carlos E. M. Braz^a e Vanessa N. Alves^a

^aInstituto de Química, Universidade Federal de Catalão, 75704-020 Catalão – GO, Brasil

Recebido: 19/01/2025; aceito: 26/02/2025; publicado online: 01/04/2025

*e-mail: brunoeliassantos@yahoo.com.br

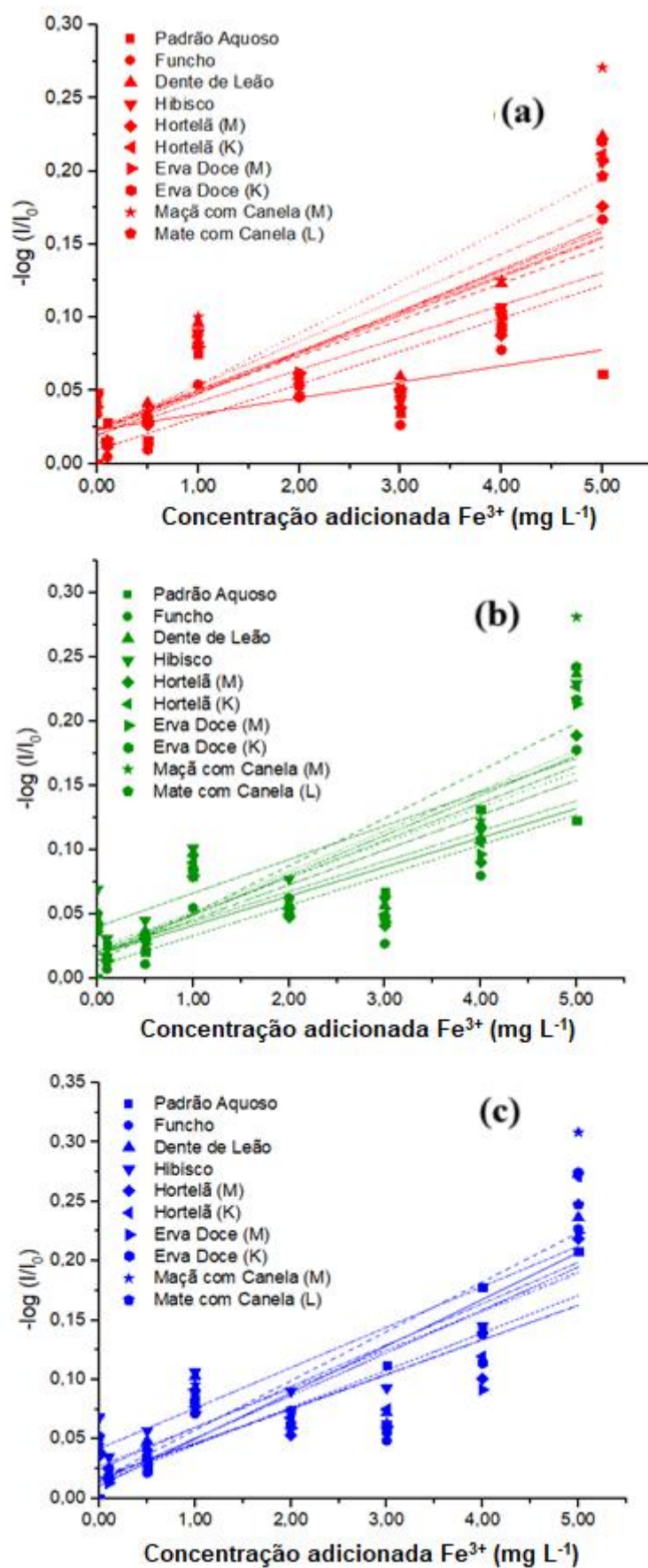


Figura 1S. Curvas de calibração por adição de padrão das amostras de infusões de plantas medicinais, obtidas por imagens digitais para os canais R (a), G (b) e B (c)

Tabela 1S. Parâmetros estatísticos do modelo de calibração MLR-SA para as amostras de chá de funcho ($p = 0,05$)

Estatística de regressão					
R					0,975340825
R ²					0,951289726
R ² ajustado					0,91475702
Erro padrão					0,54999164
Observações					8
ANOVA					
	gl	SQ	MQ	F	F de significação
Regressão	3	23,63003678	7,876679	26,0394	0,004375888
Resíduo	4	1,209963218	0,302491		
Total	7	24,84			
		Coeficiente	Erro padrão	valor-t	valor-p
Interseção		-0,485031984	0,339379447	-1,42917	0,226164
R		159,4694502	86,5829383	1,841811	0,139305
G		-285,6409442	89,57438017	-3,18887	0,033252
B		130,2656984	28,21182993	4,617414	0,0099

ANOVA: análise de variância; gl: graus de liberdade; SQ: soma quadrática; MQ: média quadrática; R: *red*; G: *green*; B: *blue*; R²: coeficiente de determinação.

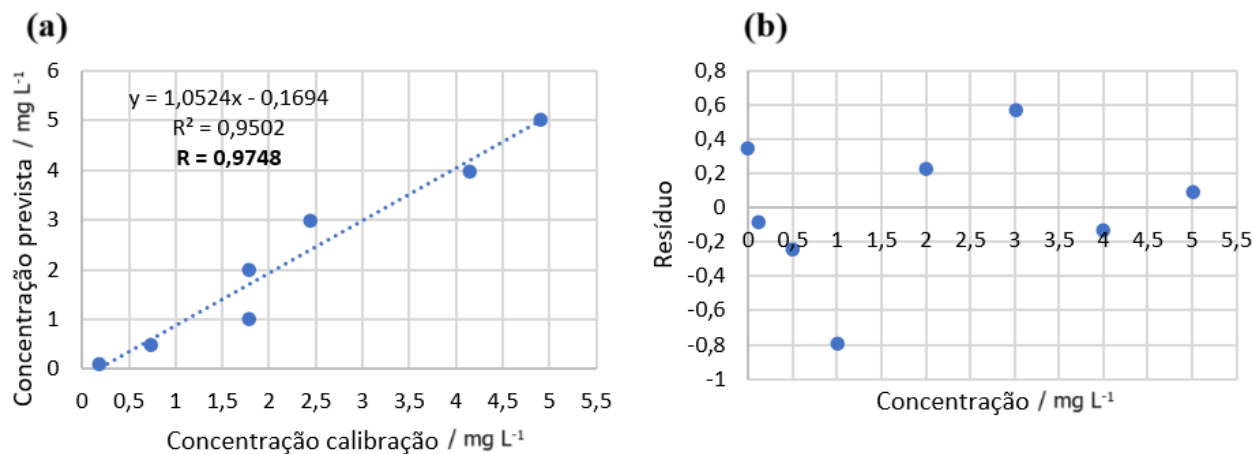


Figura 2S. Correlação entre os valores de concentração de Fe^{3+} adicionado e os valores previstos pela calibração MLR (a) e o gráfico de distribuição dos resíduos (b) para as amostras de infusão de funcho

Tabela 2S. Parâmetros estatísticos do modelo de calibração MLR-SA para as amostras de chá de dente de leão ($p = 0,05$)

Estatística de regressão					
R				0,944755008	
R ²				0,892562025	
R ² ajustado				0,811983544	
Erro padrão				0,816816885	
Observações				8	
ANOVA					
	gl	SQ	MQ	F	F de significação
Regressão	3	22,17124071	7,390414	11,07693	0,020851555
Resíduo	4	2,668759293	0,66719		
Total	7	24,84			
		Coefficiente	Erro padrão	valor- <i>t</i>	valor- <i>p</i>
Interseção		−0,723113166	0,84590893	−0,85484	0,44082
R		−167,5476033	251,8523272	−0,66526	0,54228
G		5,577038899	149,8407251	0,03722	0,972093
B		176,2698319	102,3546926	1,722147	0,016015

ANOVA: análise de variância; gl: graus de liberdade; SQ: soma quadrática; MQ: média quadrática; R: *red*; G: *green*; B: *blue*; R²: coeficiente de determinação.

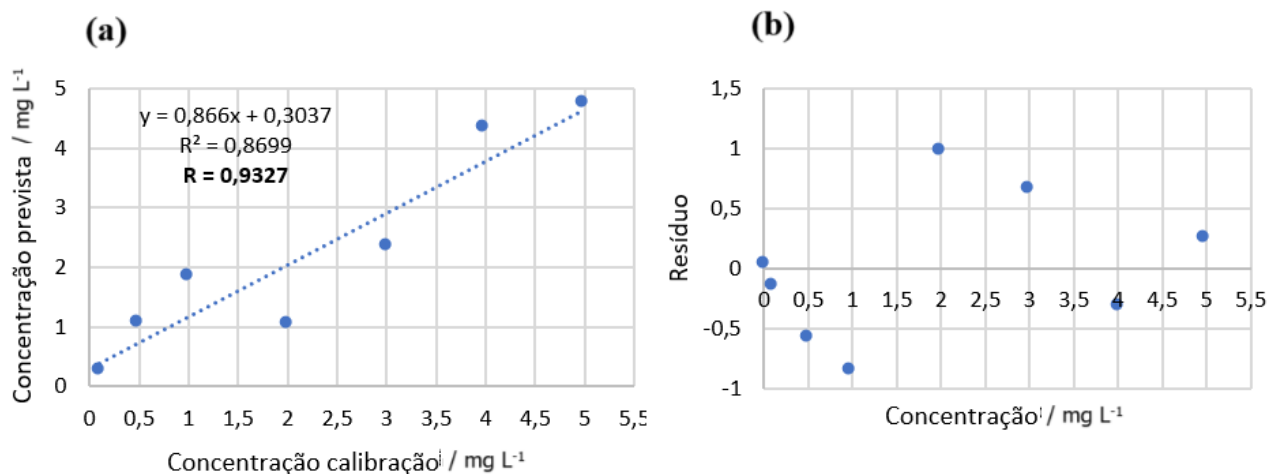


Figura 3S. Correlação entre os valores de concentração de Fe^{3+} adicionado e os valores previstos pela calibração MLR (a) e o gráfico de distribuição dos resíduos (b) para as amostras de infusão de dente de leão

Tabela 3S. Parâmetros estatísticos do modelo de calibração MLR-SA para as amostras de chá de hibisco ($p = 0,05$)

Estatística de regressão					
R					0,986044009
R ²					0,972282787
R ² ajustado					0,944565575
Erro padrão					0,362317538
Observações					7
ANOVA					
	gl	SQ	MQ	F	F de significação
Regressão	3	13,81474943	4,604916478	35,07866408	0,007768347
Resíduo	3	0,393821994	0,131273998		
Total	6	14,20857143			
		Coeficiente	Erro padrão	valor-t	valor-p
Interseção		-1,795598463	1,107686719	-1,62103457	0,203457148
R		-31,96641008	50,62628992	-0,631419172	0,572596732
G		-50,88753567	47,76993016	-1,065262928	0,364886785
B		102,94928	14,57197119	7,06488358	0,005830237

ANOVA: análise de variância; gl: graus de liberdade; SQ: soma quadrática; MQ: média quadrática; R: *red*; G: *green*; B: *blue*; R²: coeficiente de determinação.

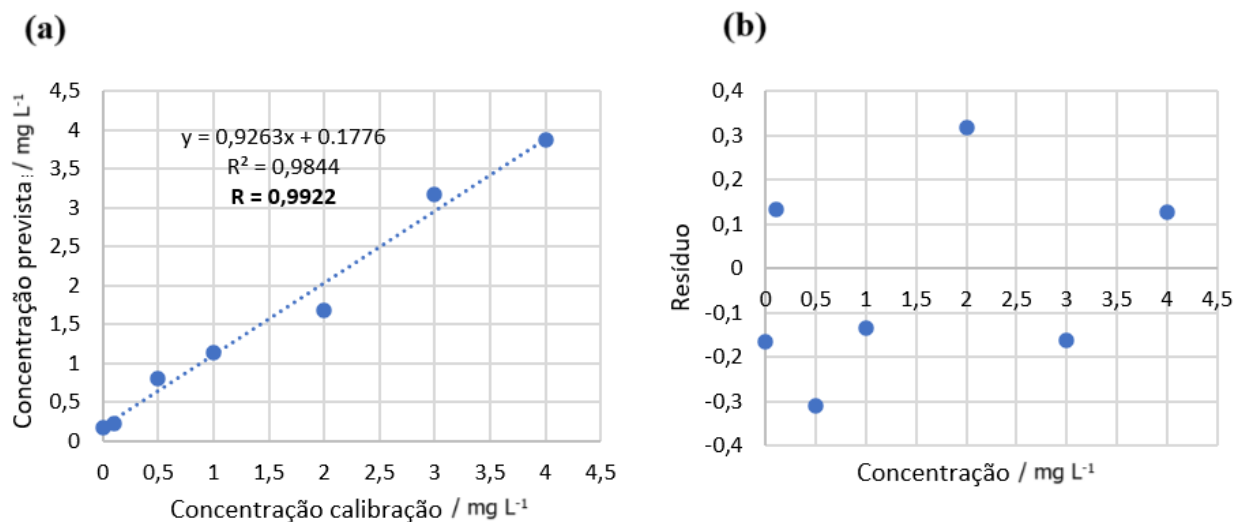


Figura 4S. Correlação entre os valores de concentração de Fe^{3+} adicionado e os valores previstos pela calibração MLR (a) e o gráfico de distribuição dos resíduos (b) para as amostras de infusão de hibisco

Tabela 4S. Parâmetros estatísticos do modelo de calibração MLR-SA para as amostras de chá de hortelã (M)
($p = 0,05$)

Estatística de regressão					
R				0,971590647	
R ²				0,943988386	
R ² ajustado				0,915982579	
Erro padrão				0,446050731	
Observações				7	
ANOVA					
	gl	SQ	MQ	F	F de significação
Regressão	2	13,41272641	6,706363204	33,70688029	0,003137301
Resíduo	4	0,79584502	0,198961255		
Total	6	14,20857143			
		Coeficiente	Erro padrão	valor-t	valor-p
Interseção		-0,708740321	0,376963122	-1,880131715	0,133260933
G		-111,4123705	24,52218122	-4,543330361	0,010470551
B		142,6674169	22,81714468	6,252641113	0,003336146

ANOVA: análise de variância; gl: graus de liberdade; SQ: soma quadrática; MQ: média quadrática; R: *red*; G: *green*; B: *blue*; R²: coeficiente de determinação.

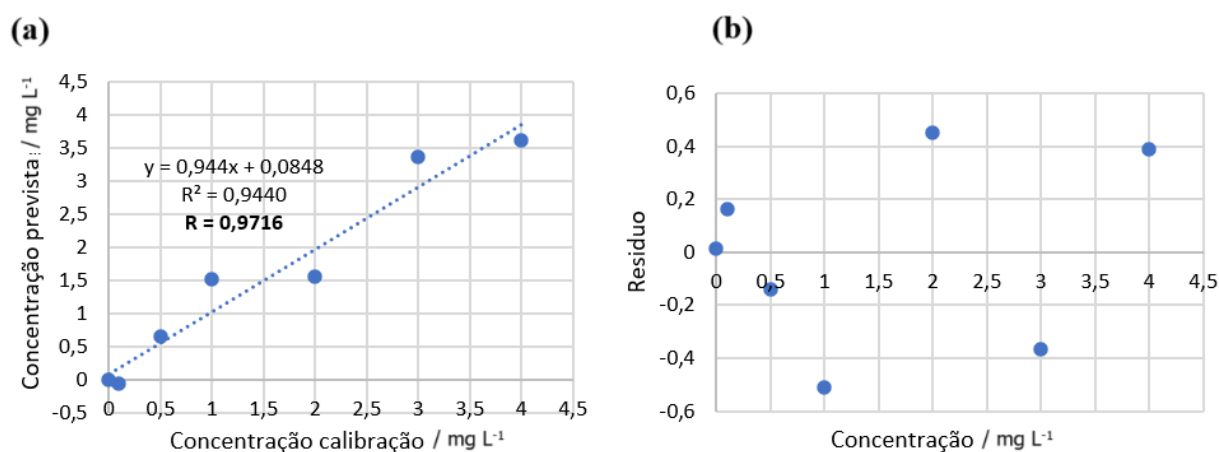


Figura 5S. Correlação entre os valores de concentração de Fe^{3+} adicionado e os valores previstos pela calibração MLR (a) e o gráfico de distribuição dos resíduos (b) para as amostras de infusão de hortelã (M)

Tabela 5S. Parâmetros estatísticos do modelo de calibração MLR-SA para as amostras de chá de hortelã (K)
($p = 0,05$)

Estatística de regressão					
R				0,8742786	
R ²				0,76436307	
R ² ajustado				0,646544606	
Erro padrão				0,914885805	
Observações				7	
ANOVA					
	Gl	SQ	MQ	F	F de significação
Regressão	2	10,86050728	5,430253642	6,487633935	0,050524763
Resíduo	4	3,348064146	0,837016036		
Total	6	14,20857143			
		Coefficiente	Erro padrão	valor-t	valor-p
Interseção		-0,571083482	0,981077474	-0,582098251	0,591731603
R		-17,19889521	14,45710828	-1,189649747	0,299970845
B		42,01396082	11,82996182	3,551487439	0,023766826

ANOVA: análise de variância; gl: graus de liberdade; SQ: soma quadrática; MQ: média quadrática; R: *red*; G: *green*; B: *blue*; R²: coeficiente de determinação.

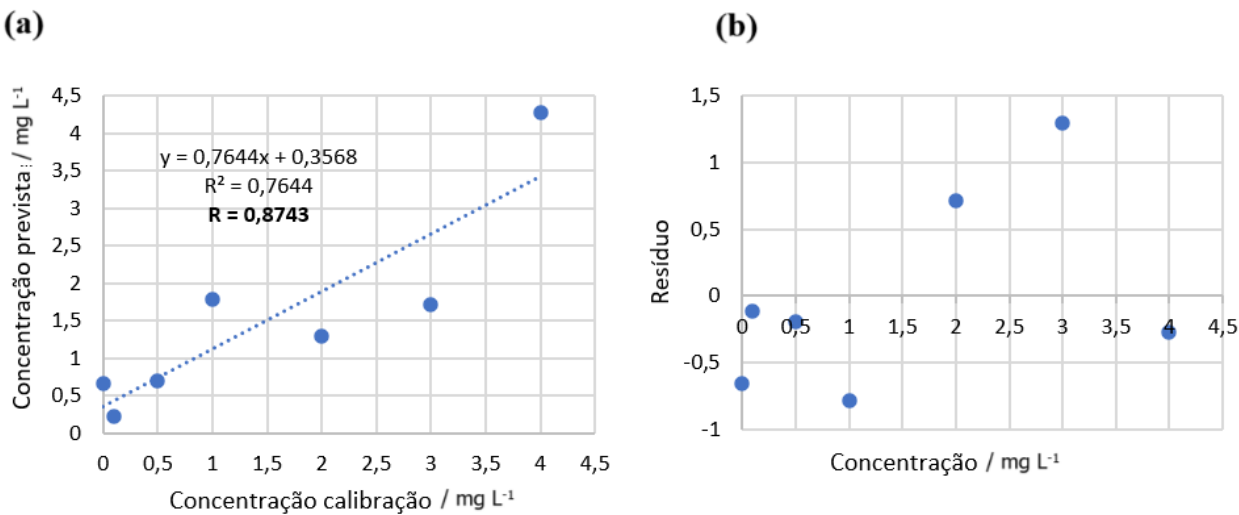


Figura 6S. Correlação entre os valores de concentração de Fe³⁺ adicionado e os valores previstos pela calibração MLR (a) e o gráfico de distribuição dos resíduos (b) para as amostras de infusão de hortelã (K)

Tabela 6S. Parâmetros estatísticos do modelo de calibração MLR-SA para as amostras de chá de erva doce (M) ($p = 0,05$)

Estatística de regressão					
R					0,894665019
R ²					0,800425496
R ² ajustado					0,650744618
Erro padrão					1,11326442
Observações					8
ANOVA					
	gl	SQ	MQ	F	F de significação
Regressão	3	19,88256932	6,627523	5,347547	0,069510556
Resíduo	4	4,957430676	1,239358		
Total	7	24,84			
		Coeficiente	Erro padrão	valor-t	valor-p
Interseção		-0,593940377	1,000845506	-0,59344	0,584817
R		131,6284955	127,4745025	1,032587	0,360138
G		-155,7956595	115,3582704	-1,35054	0,248193
B		53,63685513	55,58419434	0,964966	0,389207

ANOVA: análise de variância; gl: graus de liberdade; SQ: soma quadrática; MQ: média quadrática; R: *red*; G: *green*; B: *blue*; R²: coeficiente de determinação.

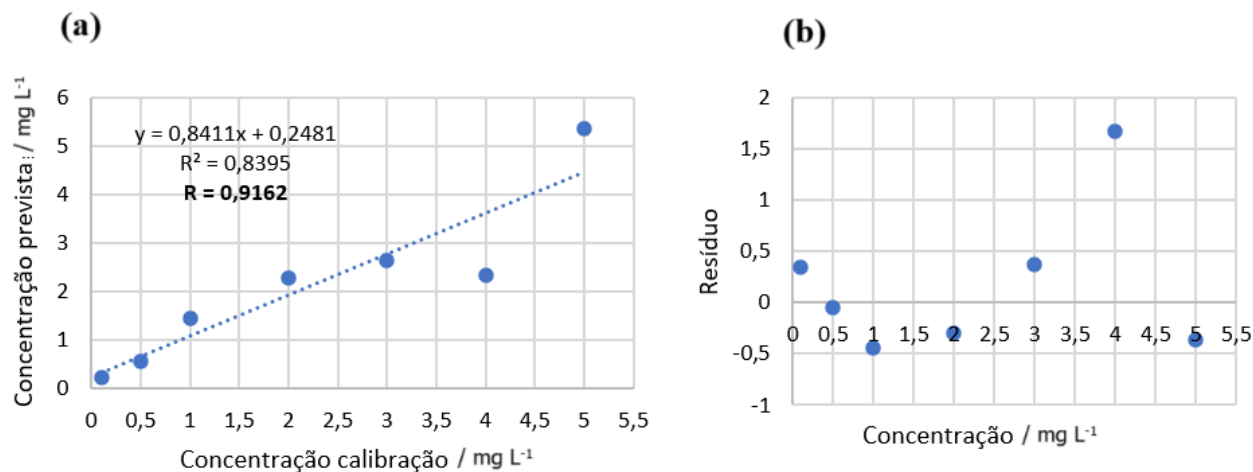


Figura 7S. Correlação entre os valores de concentração de Fe^{3+} adicionado e os valores previstos pela calibração MLR (a) e o gráfico de distribuição dos resíduos (b) para as amostras de infusão de erva doce (M)

Tabela 7S. Parâmetros estatísticos do modelo de calibração MLR-SA para as amostras de chá de erva doce (K) ($p = 0,05$)

Estatística de regressão					
R	0,893128196				
R ²	0,797677975				
R ² ajustado	0,645936456				
Erro padrão	1,120901323				
Observações	8				
ANOVA					
	gl	SQ	MQ	<i>F</i>	<i>F</i> de significação
Regressão	3	19,8143209	6,604774	5,256821	0,071361286
Resíduo	4	5,025679101	1,25642		
Total	7	24,84			
		Coeficiente	Erro padrão	valor- <i>t</i>	valor- <i>p</i>
Interseção		0,404525539	0,695865592	0,581327	0,592204
R		174,6202343	138,7952705	1,258114	0,276783
G		−316,6741653	214,1571852	−1,4787	0,213302
B		157,8307901	94,94415642	1,662354	0,171776

ANOVA: análise de variância; gl: graus de liberdade; SQ: soma quadrática; MQ: média quadrática; R: *red*; G: *green*; B: *blue*; R²: coeficiente de determinação.

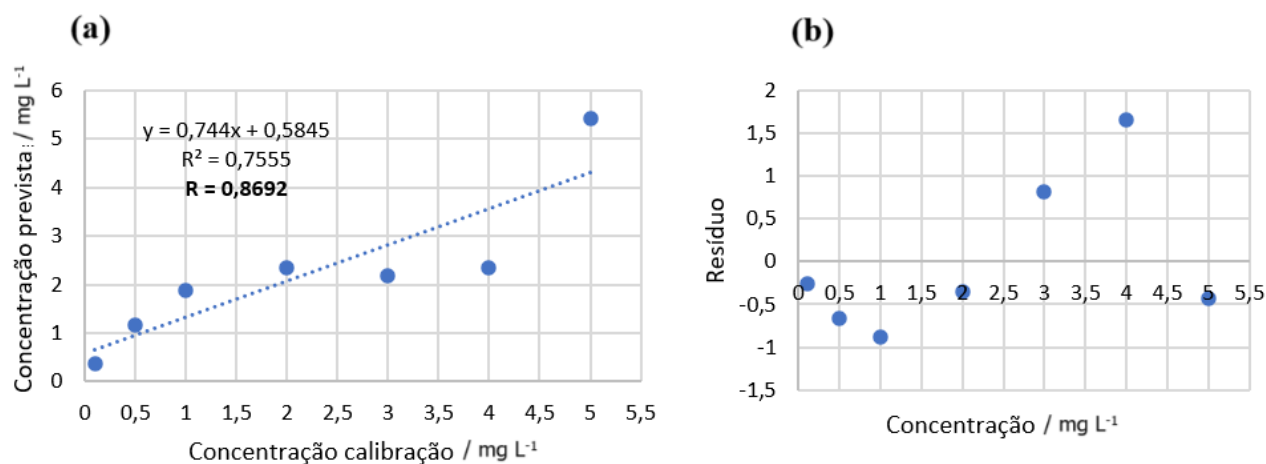


Figura 8S. Correlação entre os valores de concentração de Fe³⁺ adicionado e os valores previstos pela calibração MLR (a) e o gráfico de distribuição dos resíduos (b) para as amostras de infusão de erva doce (K)

Tabela 8S. Parâmetros estatísticos do modelo de calibração MLR-SA para as amostras de chá de maçã com canela (M) ($p = 0,05$)

Estatística de regressão					
R	0,960988266				
R ²	0,923498447				
R ² ajustado	0,892897826				
Erro padrão	0,616489832				
Observações	8				
ANOVA					
	gl	SQ	MQ	<i>F</i>	<i>F</i> de significação
Regressão	2	22,93970143	11,46985	30,17908	0,001618735
Resíduo	5	1,900298567	0,38006		
Total	7	24,84			
		Coefficiente	Erro padrão	valor- <i>t</i>	valor- <i>p</i>
Interseção		−0,359415005	0,370381818	−0,97039	0,37642
G		−169,1805379	44,51755648	−3,80031	0,012624
B		173,0851596	41,1758493	4,20356	0,008461

ANOVA: análise de variância; gl: graus de liberdade; SQ: soma quadrática; MQ: média quadrática; R: *red*; G: *green*; B: *blue*; R²: coeficiente de determinação.

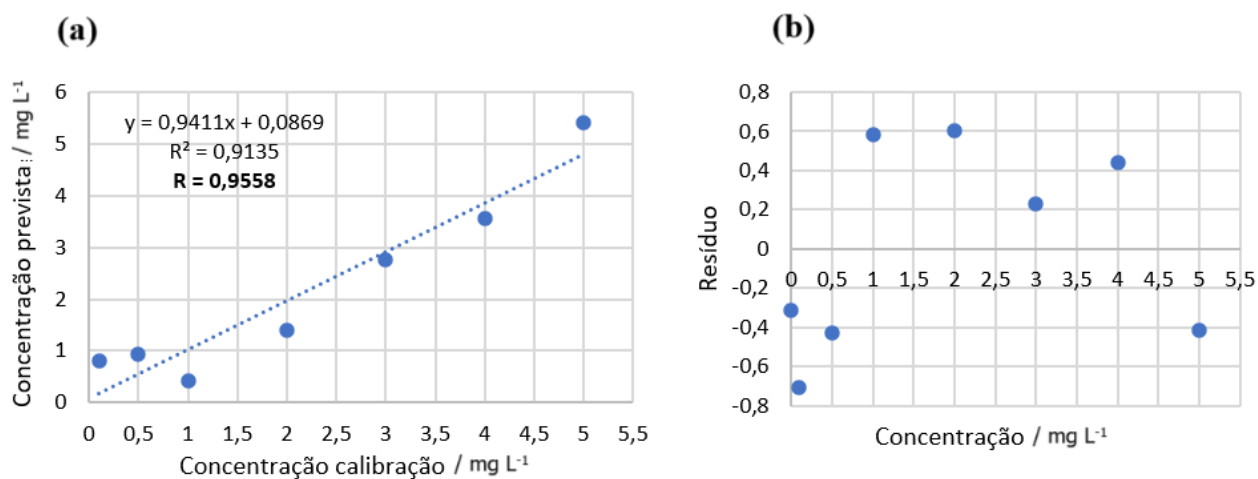


Figura 9S. Correlação entre os valores de concentração de Fe^{3+} adicionado e os valores previstos pela calibração MLR (a) e o gráfico de distribuição dos resíduos (b) para as amostras de infusão de maçã com canela (M)

Tabela 9S. Parâmetros estatísticos do modelo de calibração MLR-SA para as amostras de chá de mate com canela (L) ($p = 0,05$)

Estatística de regressão					
R	0,967433039				
R ²	0,935926685				
R ² ajustado	0,887871698				
Erro padrão	0,630789416				
Observações	8				
ANOVA					
	gl	SQ	MQ	<i>F</i>	<i>F</i> de significação
Regressão	3	23,24841885	7,749473	19,47616	0,007531175
Resíduo	4	1,591581148	0,397895		
Total	7	24,84			
		Coeficiente	Erro padrão	valor- <i>t</i>	valor- <i>p</i>
Interseção		−0,758509728	0,476552622	−1,59166	0,186674
R		92,08518128	98,13330275	0,938368	0,401183
G		−216,4747365	96,49117135	−2,24347	0,088282
B		139,2189353	34,6609112	4,016598	0,015909

ANOVA: análise de variância; gl: graus de liberdade; SQ: soma quadrática; MQ: média quadrática; R: *red*; G: *green*; B: *blue*; R²: coeficiente de determinação.

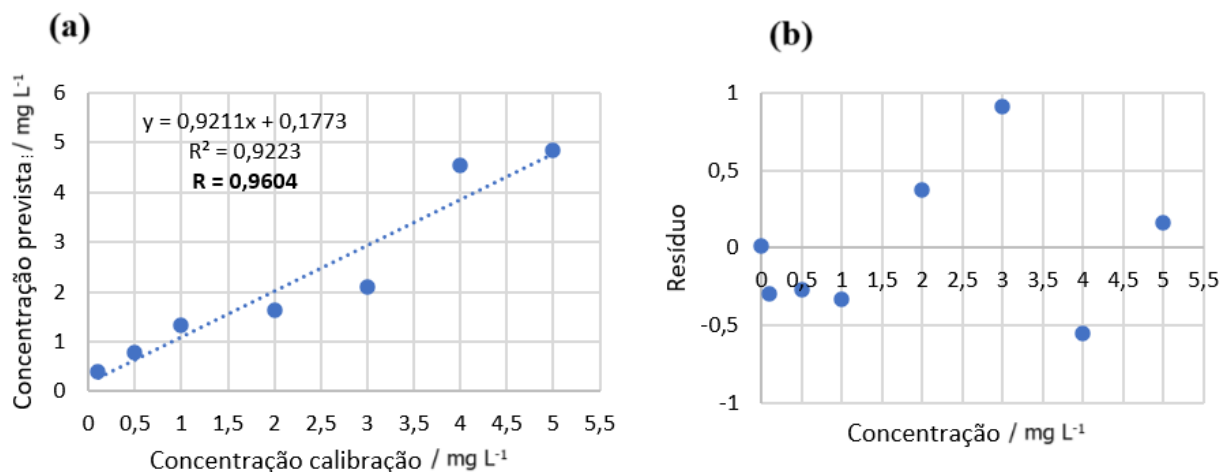


Figura 10S. Correlação entre os valores de concentração de Fe^{3+} adicionado e os valores previstos pela calibração MLR (a) e o gráfico de distribuição dos resíduos (b) para as amostras de infusão de mate com canela (K)

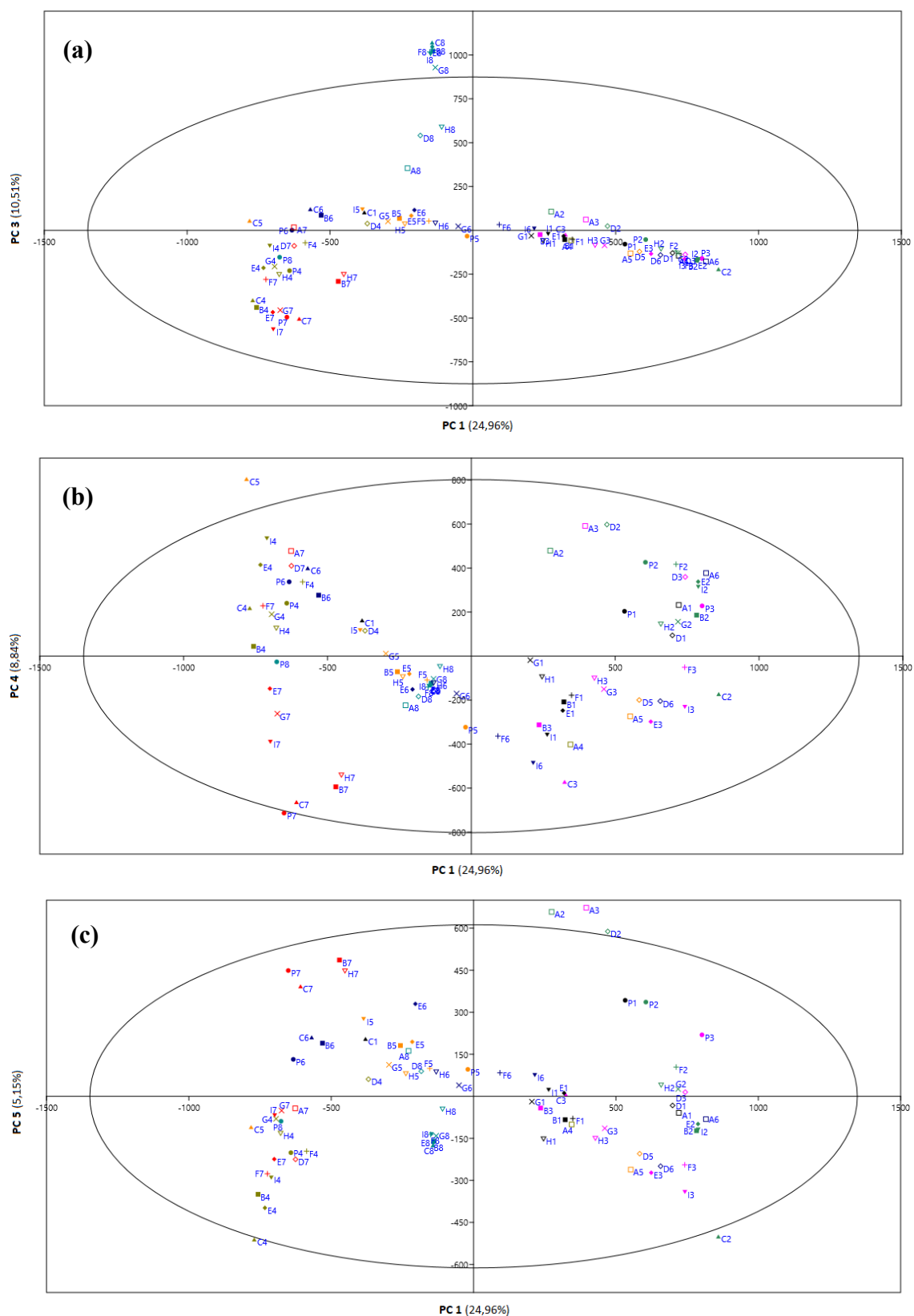


Figura 11S. Gráfico dos scores para todas as amostras de infusões com adição de padrão, incluindo os padrões aquosos para as seguintes componentes principais: PC1 vs. PC3 (a), PC1 vs. PC4 (b) e PC1 vs. PC5 (c), restritos a elipse de 95% de confiança

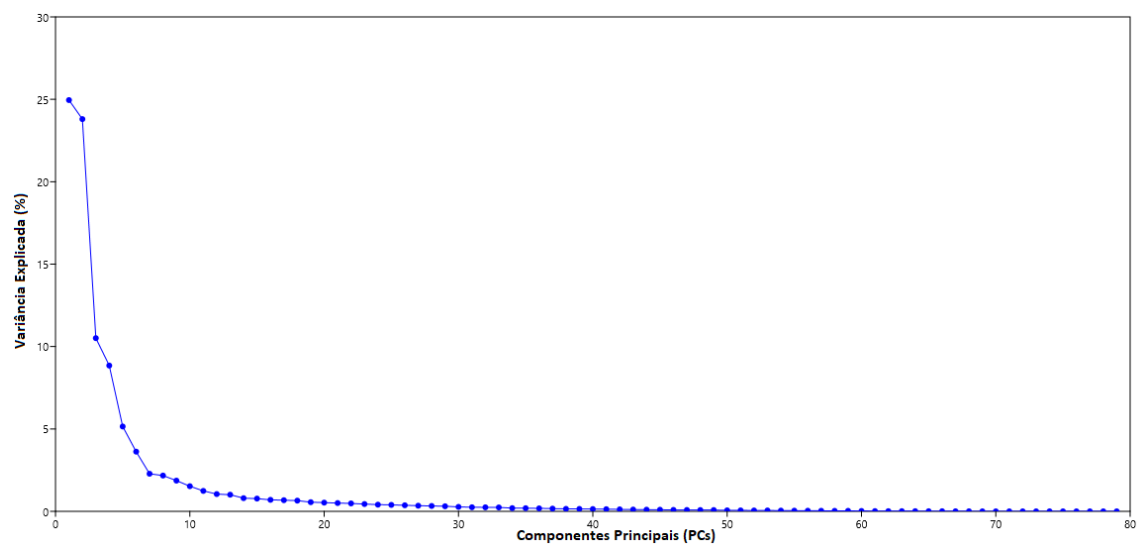


Figura 12S. Gráfico de variância explicada pelas componentes principais do modelo de análise exploratória