

Análise de componentes principais de resíduos de banana, café e coco.

Magale K.D. Rambo (PQ)^{1*}, Márcia M.C. Ferreira (PQ)²

¹Curso de Licenciatura em Química / UFT

²Instituto de Química/LQTA /UNICAMP

*magalirambo@yahoo.com.br

Palavras Chave: biomassa residual, espectroscopia NIR, quimiometria.

Introdução

A análise por componentes principais (PCA) é um procedimento matemático que projeta a matriz de dados com muitas variáveis, em um espaço de dimensão menor. Como resultado, as informações mais importantes e relevantes se tornam mais fáceis de serem interpretadas (Wold *et al.*, 1987). Nesse estudo a PCA foi utilizada para uma análise exploratória dos dados, verificando agrupamento entre diferentes amostras, bem como a relação entre amostras e variáveis.

Resultados e Discussão

Os resultados da PCA dos espectros brutos da região Vis-NIR (Visível-Infravermelho próximo) das 104, 102 e 30 amostras de banana, café e coco, respectivamente, centrados na média, com rotação varimax são mostrados nas Figuras 1 e 2.

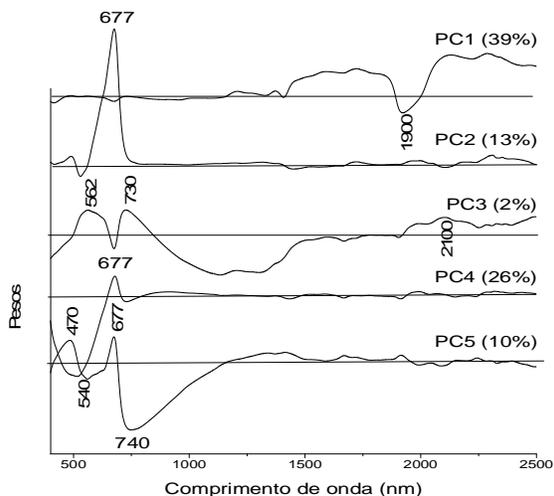


Figura 1. Gráfico de pesos da análise PCA.

A região do espectro visível foi importante para todas as PC, exceto para PC1. A mesma variabilidade na composição das amostras resulta em uma maior variabilidade na região Vis do que no NIR como ocorreu para a PC2, PC3, PC4 e PC5, com 51% da variância acumulada. A PC1 é caracterizada por pesos negativos em torno de 1900 nm, típico de estiramento OH, provavelmente de celulose (Shenk *et al.*, 2008), indicando que as

cascas de café, apresentam menores percentuais de celulose, do que as frações de coco e banana. Por outro lado, a PC2 foi caracterizada por pesos positivos em 677 nm, típico de bandas de clorofila e, conforme esperado, essa PC diferencia amostras de folhas, ricas nesses pigmentos fotossintéticos (Figura 2). A PC3 apresenta pesos positivos em 562, 730 e 2100 nm, associados respectivamente à clorofila, estiramento ROH e banda de combinação de ROH. A PC4 apresenta uma banda negativa em 540 nm, típica de pigmentos acessórios de plantas. Essa PC diferencia amostras de café com escores negativos indicando que elas apresentam altos teores de carotenóides quando comparado às amostras de banana e coco (dados não mostrados). A PC5 é caracterizada por pesos positivos em 470 e 677 nm, típicos de clorofila (Shenk *et al.*, 2008).

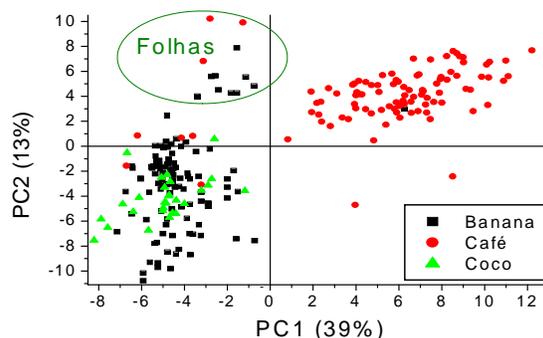


Figura 2. Gráfico de escores das duas primeiras componentes principais.

Conclusões

Esses resultados mostram a habilidade da PCA no auxílio da atribuição de bandas e na interpretação dos dados. Além do mais, esse estudo demonstra a possibilidade da combinação das diferentes biomassas em modelos futuros de calibração multivariada.

Agradecimentos

(FP7/2007-2013); DIBANET.

¹ WOLD, S; ESBENSEN, K; GELADI, P. *Chem. Intell. Lab. Syst.* 2, 37-52, 1987.

² SHENK, J. S; WORKMAN, J. J; WESTERHAUS, M. *Handbook of Near-Infrared Analysis*, Florida, 2008.