

Utilização das análises de PCA, PLS e HCA na distinção entre rums produzidos em Cuba e em outros países.

Olívia Moreira Sampaio(PG)*, Carlos Alexandre Galinaro(PG), Benedito dos Santos Lima-Neto(PQ), Douglas Wagner Franco(PQ)

Instituto de Química de São Carlos - Universidade de São Paulo

*olysampa@iqsc.usp.br

Palavras Chave: Rum, Metais, Quimiometria

Introdução

O Rum, Rhum ou Ron, como é conhecido, é uma bebida alcoólica produzida da destilação do melaço ou do caldo de cana cozido após fermentação, com graduação alcoólica entre 54 a 70% v/v^{1,2}. A presença de íons metálicos em bebidas está relacionado diretamente com o processo de produção e com fatores regionais (composição mineral do solo, da água, etc)³. Por isso a composição mineral do rum tornou-se indispensável, pois se acredita que sua determinação estabelecerá uma relação de comparação entre rums das mais variadas procedências.

Nesse trabalho foram analisados 15 íons metálicos (Li, Mg, Na, Ca, Zn, Ba, Fe, Pb, Mn, Co, Ni, Cr, Cd, Sr, Cu) utilizando-se absorção atômica (AAS) e emissão atômica (ICP OES). Os resultados analíticos obtidos foram analisados utilizando as seguintes técnicas quimiométricas: PLS (Partial Least Square), HCA (Hierarchical Cluster Analysis) e PCA (Principal Component Analysis).

Resultados e Discussão

As análises de PCA e PLS foram as que apresentaram os melhores resultados. As porcentagens de similaridade obtidas por PCA e por PLS para os rums cubanos com respeito aos demais foram superiores a 70,0% (figuras 1 e 2), sendo que os discriminantes utilizados nesta separação foram os íons de Mg, Mn, Ca e Fe. A análise de HCA não apresentou resultados satisfatórios para esta separação.

Tabela1. Valores médios e mediana das concentrações em mg.L⁻¹ do Mg, Mn, Ca e Fe.

Metais	Média	Mediana
Mg	0.311	0.087
Mn	0.020	0.013
Ca	0.801	0.537
Fe	0.117	0.060

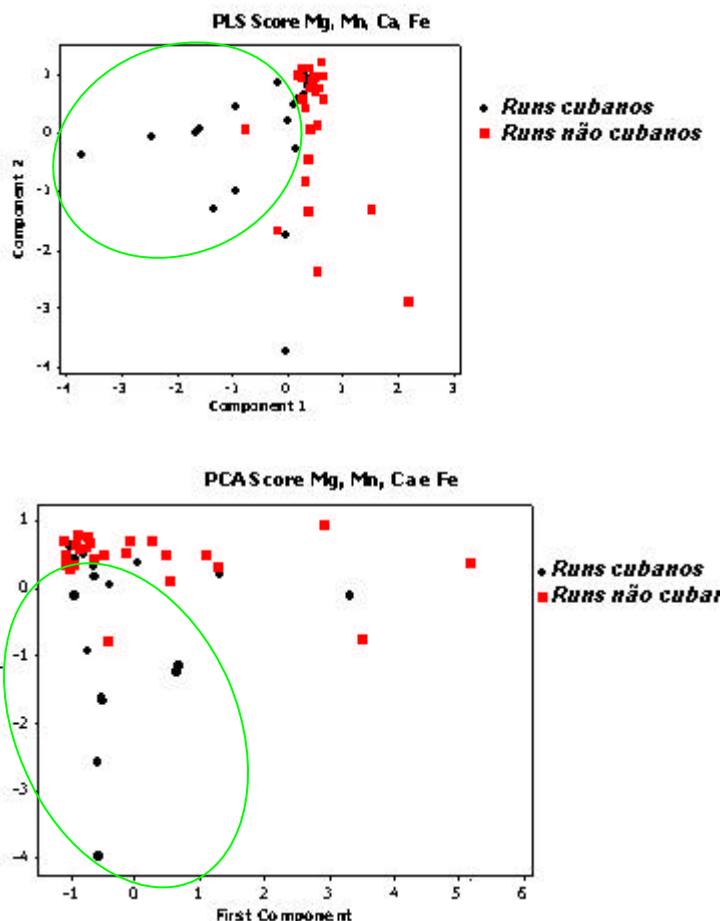


Figura 1. Gráfico de PLS score (Mg, Mn, Ca, Fe)

Figura 2. Gráfico de PCA score (Mg, Mn, Ca, Fe)

Conclusões

As análises de PLS e PCA apresentaram resultados satisfatórios, superiores a 70%, em que o Mg, Mn, Ca, Fe foram os melhores descritores. Novos discriminantes químicos estão sendo analisados (álcoois superiores, carbamato de etila, aldeídos e cetonas), pelas quais espera-se melhores resultados na distinção dos rums.

Agradecimentos

CAPES, FAPES CNPq

1 Eur. Food Res. Technol(2003) 218:105-110

2 Diário Oficial da União, nº 124, página 3, ISSN. 1677-7042, 30/06/2005

3 Leite Neto, A. F., 2003, p.9-11, Dissertação de Mestrado, IQSC/USP.