

Máquinas de vetor de suporte por mínimos quadrados aplicada a reflectância difusa no infravermelho próximo na determinação de adulterantes no leite em pó.

Alessandra Borin*¹ (PG), Danilo Althmann Maretto¹ (PG), Marco Flôres Ferrão² (PQ), César Mello³ (PQ), Ronei Jesus Poppi¹ (PQ)

¹LAQQA- Laboratório de Quimiometria em Química Analítica Instituto de Química – UNICAMP, Caixa Postal 6154, CEP 13083-970, Campinas, SP, Brasil. ²Departamento de Química e Física, Universidade de Santa Cruz do Sul, C.P. 188, CEP: 96815-900, Santa Cruz do Sul, RS, Brazil. ³ Instituto de Química, Universidade de Franca, C.P. 32, CEP: 14404-600, Franca, SP, Brazil.

Palavras Chave: Máquinas de vetor de suporte, Reflectância difusa, Leite em pó.

Introdução

As máquinas de vetor de suporte (em inglês support vector machines – SVM) representam uma técnica de modelagem não linear que tem sido aplicada recentemente na quimiometria^{1,2}. Neste trabalho é proposta a determinação dos adulterantes mais comuns de leite em pó (soro de leite em pó, amido e sacarose) com o emprego das máquinas de vetor de suporte associadas a mínimos quadrados (LS-SVM) empregando dados de reflectância difusa no infravermelho próximo (NIRR) que é uma técnica não destrutiva, rápida e que não necessita preparo da amostra. O conjunto utilizado contém 216 amostras sendo elas, 45 amostras contaminadas com amido, 45 com soro, 45 com sacarose, numa faixa de concentração de 1% to 50% (m/m), 27 amostras com amido/soro, 27 com sacarose/amido e 27 com sacarose/soro, em 6 níveis de concentração (4, 8, 12, 15, 20 e 25%). Os espectros de reflectância difusa foram realizadas no espectrofômetro CARY 5G UV/VIS/NIR na região do NIR (1027.5–2400.0 nm).

Resultados e Discussão

Foi realizado a análise por componentes principais (PCA) para os espectros das 216 amostras e na figura 1 é possível observar a separação dos grupos em função dos diferentes tipos de contaminantes. Ocorre apenas uma sobreposição entre as amostras contaminadas com sacarose e soro/sacarose. Para o modelo foi usado 150 amostras para calibração e 66 para validação. Com base nos resultados da tabela 1 podemos observar que as SVM-LS apresenta um maior poder de previsão do que o PLS e a maior vantagem foi a capacidade de prever a ausência (não presença) de adulterantes nas amostras, enquanto o PLS apresentou falsos positivos.

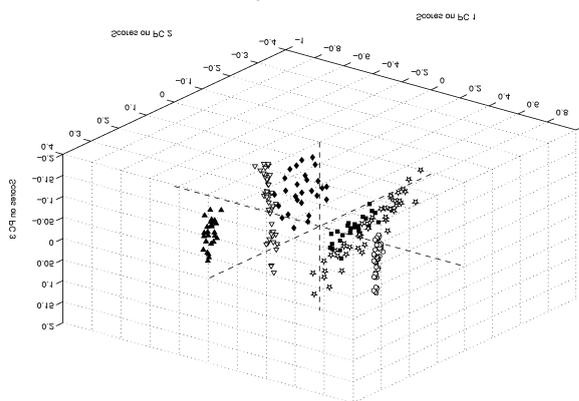


Figura 1. Gráfico 3D do PCA. Tipo de adulterante: (Δ) amido; (\circ) soro; (\star) sacarose; (?) amido/ soro; (\diamond) amido/ sacarose; (\blacksquare) soro/ sacarose.

Tabela 1. Comparação dos resultados entre PLS e LS-SVM para modelo com 1 e 2 adulterantes

	Amido		Soro		Sacarose	
	PLS	LS-SVM	PLS	LS-SVM	PLS	LS-SVM
R ²	0.98	1.00	0.94	1.00	0.99	1.00
RMSECV (%)	2.00	1.02	3.06	1.47	1.53	0.91
RMSEP(%)	1.96	1.01	3.17	1.12	1.38	0.56

Conclusões

As LS-SVM, mesmo quando os dados apresentam não linearidade, quantificam os três tipos de adulterantes de leite em pó, bem como conseguem prever amostras que não estejam contaminadas com alguns destes, ou seja, os “zeros” do modelo.

Agradecimentos

Agradecimentos ao CNPq e a Empresa Tangará - Leite em pó e Formulações Lácteas (Vitória-ES).

¹ R. P. Cogdill, L. R. Schimleck, P. D. Jones, G. F. Peter, R. F. Daniels and A. Clark, J. Near Infrared Spectrosc., 2004, 12, 263.

² U. Thissen, B. Üstün, W.J. Melssen and L.M.C. Buydens, Anal. Chem., 2004, 76, 3099.