

Classificação quimiométrica de vinagres nacionais utilizando espectros de RMN de ¹H

Elisangela F. Boffo^{1*} (PG), Leila A. Tavares¹ (PG), Antonio G. Ferreira¹ (PQ), Márcia M. C. Ferreira² (PQ) efboffo@yahoo.com.br

¹ Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear, Departamento de Química, UFSCar, São Carlos, SP.

² Instituto de Química, UNICAMP, Campinas, SP.

Palavras Chave: Vinagre, RMN de ¹H, quimiometria.

Introdução

Vários tipos de vinagres são produzidos atualmente. Os materiais utilizados na obtenção dos mesmos são de fontes variadas e determinam os custos dos produtos. Os mais comercializados no Brasil são os de vinho, maçã, álcool e *agrin*. Esse último é um fermentado acético de álcool e vinho. Pretende-se nesse trabalho classificar os vinagres comerciais nessas quatro categorias aplicando-se os métodos quimiométricos¹ KNN, SIMCA e PLS-DA aos espectros de RMN de ¹H. Além disso, discriminar esses vinagres daqueles produzidos a partir do mel, abacaxi, laranja e arroz.

Resultados e Discussão

Na análise exploratória, empregando-se a análise por componentes principais (PCA), as amostras foram discriminadas em três grupos distintos conforme o material usado (álcool/*agrins*, vinho e maçã). Os *agrins* foram agrupados juntamente com vinagres de álcool, pois provavelmente possuem um alto teor desse. Além disso, o grupo dos vinagres de vinho foi dividido em dois subgrupos, artesanais e industriais, figura 1.

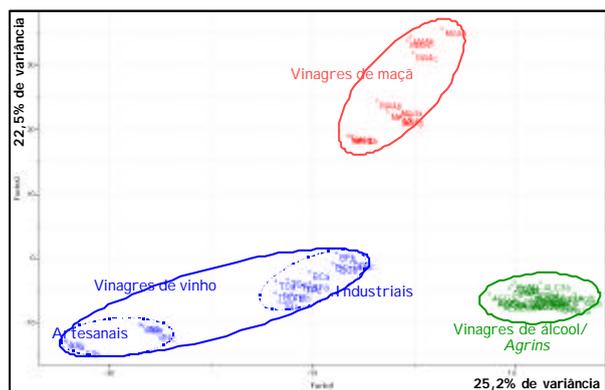


Figura 1. Gráfico de scores dos dados de RMN de ¹H dos vinagres comumente comercializados

A partir desse resultado foram construídos os modelos de classificação, KNN, SIMCA e PLS-DA, os quais foram utilizados para avaliar as características de amostras desconhecidas. Sendo essas atribuídas corretamente em suas categorias,

considerando a informação no rótulo do produto. Somente no PLS-DA houve erro de classificação para dois vinagres de vinho, tabela 1.

Tabela 1. Previsão das classes, obtida pelos métodos KNN, SIMCA e PLS-DA, para os vinagres

Classe real	Classe prevista								
	KNN			SIMCA			PLS-DA		
	V	M	A/A	V	M	A/A	V	M	A/A
Vinho (V)	7	0	0	7	0	0	5	0	2
Maçã (M)	0	2	0	0	2	0	0	2	0
Álcool/ <i>Agrin</i> (AA)	0	0	12	0	0	12	0	0	12

Tendo como objetivo avaliar o comportamento de alguns vinagres especiais, tais como originados da fermentação do mel, arroz, laranja e abacaxi, foi feita uma análise por PCA, a qual resultou na discriminação de todas essas amostras em relação às comumente comercializadas (vinho, maçã, álcool e *agrins*), mostrando, assim, que essas apresentam diferenças características em suas composições.

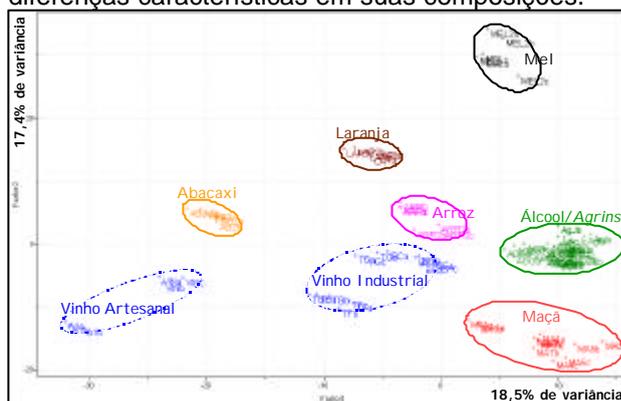


Figura 2. Gráfico de scores dos dados de RMN de ¹H de vinagres especiais e comumente comercializados

Conclusões

Os resultados obtidos indicam que a análise quimiométrica dos dados de RMN de ¹H é uma ferramenta poderosa na classificação dos vinagres de diferentes origens.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPESP e FINEP.

¹ Beebe, K. R.; Pell, R. J. e Seasholtz, M. B. *Chemometrics: a practical guide*. New York, John Wiley & Sons, Inc. **1998**.