Distinção entre as frações Cabeça, Coração e Cauda na destilação em Alambique utilizando Análise Discriminante Canônica (CDA)

Roni Vicente Reche*[1(PG)] e Douglas Wagner Franco[1(PQ)]
roniusp@yahoo.com.br

[1] *Instituto de Química de São Carlos - Universidade de São Paulo*

Palavras Chave: *Cabeça, Coração, Cauda, Alambique, CDA*

Introdução

A Análise Discriminante Canônica (*CDA – Canonical Discriminant Analysis)* é um tratamento quimiométrico que vem sendo muito utilizado no tratamento de resultados analíticos.

Em virtude de seu potencial em discriminar grupos de amostras com características diferentes, esta análise foi utilizada na distinção entre as frações cabeça, coração e cauda, obtidas quando o vinho, proveniente da fermentação do caldo de cana é destilado em alambique.

Estas três frações devem apresentar composições químicas distintas, em virtude dos diferentes pontos de ebulição dos compostos presentes na cachaça, e portanto a análise de sua composição por métodos quimiométricos deve permitir a identificação destas frações.

Resultados e Discussão

Como objetivo de contribuir para a tipificação da cachaça brasileira, foram analisados 34 analitos em 18 amostras coletadas, no estado de São Paulo, diretamente no momento de sua destilação. Os resultados analíticos foram tratados pela técnica de CDA. As amostras foram divididas em grupos conforme a fração correspondente, sendo: 4 amostras de cabeça, 10 de coração e 4 de cauda.

Na Figura 1 observa-se a presença de quatro grupos, representando cada fração da destilação em alambique.

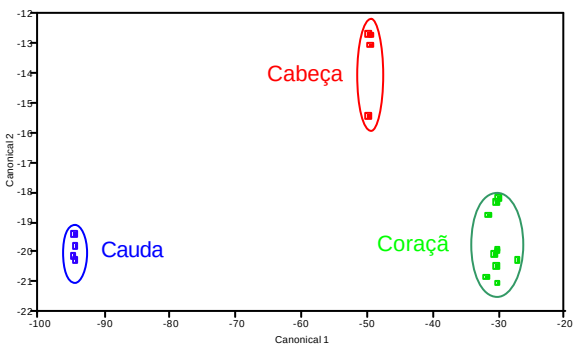

Figura 1 – Gráfico de escores obtido na CDA.

As amostras contidas dentro dos grupos observados na Figura 1 apresentam uma homogeneidade entre si e uma heterogeneidade em relação a qualquer outro grupo. Este fato representa uma especificidade química de cada grupo, diferindo dos demais.

A Tabela 1 apresenta a classificação obtida na análise de CDA para as 18 amostras.

Tabela 1 – Classificação obtida na análise de CDA.

	Cabeça	Coração	Cauda
Cabeça	4	0	0
Coração	0	10	0
Cauda	0	0	4
Total	4	10	4
Total correta	4	10	4
% Correta	100	100	100
Total amostra	18		
Total correta	18		
% correta	100		

Os melhores descritores químicos considerados nesta separação foram: grau alcoólico, formaldeído, 5-HMF, acetaldeído, acetona + acroleína, furfuraldeído, crotonaldeído, benzaldeído, cobre, magnésio, acetato de etila, metanol, butanol-2, propanol e isobutanol. Com base nestes resultados, é possível identificar a fração do destilado com uma grande margem de acerto. No momento amplia-se o universo de amostras analisadas.

Conclusões

É possível diferenciar os três tipos de frações obtidas na destilação em alambique considerando 16 descritores químicos.

Agradecimentos

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

FAPESP, CNPq e CAPES