

Análise exploratória de dados para a discriminação de leguminosas a partir da composição mineral em relação à procedência e à espécie

Wagna P. C. Santos^{1,2*} (PQ), Andréa P. Fernandes² (PQ), Rennan G. O. Araujo³ (PQ), Fabio S. de Oliveira⁴ (PQ), Maria das Graças A. Korn (PQ)², *jolurswp@gmail.com

¹Centro Federal de Educação Tecnológica da Bahia, CEFET-BA, Salvador-BA, ²NQA-PRONEX-GPQA, Departamento de Química Analítica, Instituto de Química, UFBA, Campus de Ondina, 40170-280, Salvador – BA

³Universidade Federal de Santa Catarina, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas, Dept^o de Química, Trindade, Florianópolis, SC, ⁴Centro de Ciências da Saúde, UFRB – Santo Antônio de Jesus-BA

Palavras Chave: leguminosas, PCA, HCA, ICP OES

Introdução

A análise exploratória de dados é freqüentemente utilizada para maximizar as informações que podem ser extraídas de um conjunto de dados.¹ As análises químicas associadas às técnicas de reconhecimento de padrões tem sido empregadas para o estudo da qualidade e origem de produtos alimentícios.² Neste estudo a composição mineral de principais leguminosas de grãos consumidas e produzidas no estado da Bahia, foi caracterizada em termos de traços, micro e macro elementos.

Resultados e Discussão

A determinação de macro, micro e elementos traço (Al, Ba, Ca, Co, Cr, Cu, Fe, K, Mg, Mn, Mo, Ni, P, Pb, Se, Sr, Zn) foi realizada em ICP OES simultâneo com visão axial (Varian), após digestão das amostras em forno de microondas com cavidade, segundo o procedimento: 0,50 g de amostra; 7,0 mL de HNO₃ 4,0 mol/L e 1,0 mL de H₂O₂ 30 % v/v, na temperatura máxima de 190 °C. Para a análise de componentes principais (PCA) foram utilizadas as médias (n=3) das concentrações dos macro, micro e elementos traço e o auto-escalamento como método de pré-processamento dos dados. A matriz de dados consistiu de 17 variáveis (analitos) dispostas em coluna, e 56 variáveis (amostras) dispostas em linha. O conjunto de dados foi analisado considerando-se a variável categoria de procedência: Minas Gerais, Bahia, São Paulo, Paraná, Argentina, Goiás e não identificada. Bem como, a categoria tipo de feijão: carioca, preto, branco e caupi. A segunda categoria envolve duas espécies de leguminosas: *Phaseolus vulgaris* L. (carioca, preto e branco) e *Vigna unguiculata* L. (caupi). Na PCA, as três primeiras componentes totalizaram 54,2% da variabilidade dos dados segundo ao tipo e procedência. Para a categoria tipo, na PC1 os elementos com maiores pesos foram Ba, Fe, K, Mo, Sr, Zn e Mg, sendo os dois últimos com valores negativos. Na PC2 as variáveis

Al e Mn apresentaram maiores pesos, negativo e positivo, respectivamente. Considerando-se a categoria procedência, foi observado a formação de agrupamento das amostras cultivadas na Bahia (Figura 1). Esse comportamento também pode estar associado às espécies de feijão, uma vez que, a maioria das amostras cultivadas na Bahia pertencem à espécie *Vigna unguiculata*. As análises de agrupamento hierárquico (HCA) confirmaram as informações obtidas pela PCA, considerando as categorias tipo e procedência.

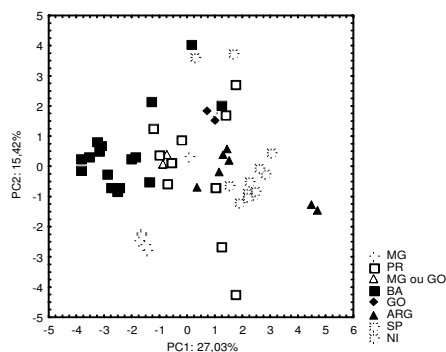


Figura 1. PC1 versus PC2 com relação à procedência.

Conclusões

A partir da análise exploratória de dados não foi possível a separação bem definida das amostras segundo as categorias tipo e procedência das leguminosas estudadas. Entretanto, alguns padrões foram observados, tais como o agrupamento das amostras de caupi cultivadas no estado da Bahia.

Agradecimentos

CAPES, CNPq e FAPESB.

¹ K. R. Beebe, R. J. Pell, and M. B. Seasholtz, *Chemometrics: a Practical Guide* (John Wiley and Sons, New York, 1998).

² A. P. Fernandes; M. C. Santos; S. G. Lemos; M. M. C. Ferreira; A. R. A. Nogueira; J. A. Nóbrega. *Spectrochim. Acta Part B*, v.60, n.5, p.717-724, 2005.