

Classificação de fontes de antocianinas por Análise de Componentes Principais e KNN.

Martha Maria Andreotti Favaro¹ (PG)*, Adriana Vitorino Rossi (PQ)

¹Instituto de Química – UNICAMP, CP 6154, CEP 13083-970, Campinas-SP, Brasil e-mail: *martha@iqm.unicamp.br.

Palavras Chave: antocianinas, fruta, corante, quimiometria, PCA, KNN.

Introdução

Antocianinas são pigmentos coloridos encontrados em vegetais, responsáveis pela coloração de flores e frutas de azul a vermelho¹. A proposta de estudos analíticos para sistematizar a classificação e identificação de fontes e extratos de antocianinas, considera as novas perspectivas do uso desses produtos em diversos segmentos da indústria².

Diversas técnicas são descritas na literatura para análise de antocianinas em fontes vegetais e extratos. Dentre elas têm destaque a cromatografia líquida de alta eficiência, espectrometria de massas e espectrofotometria UV-Visível^{3,4}.

A proposta deste trabalho foi empregar a Análise de Componentes Principais (PCA) e o método do vizinho mais próximo (KNN) para a classificação de fontes de antocianinas a partir dos espectros no visível de extratos de 6 frutas: jabuticaba (*Myrciaria cauliflora*), amora (*Morus nigra*), amora preta (*Rubus sp*), jussara (*Euterpe edulis*), jambolão (*Syzygium cumini*) e uva (*Vitis vinifera*).

Procedimento Experimental

Os extratos aquosos foram preparados por imersão das frutas em água corrente (1:3 m/V) a 55°C por 30 minutos sob termostatização². As frutas foram obtidas junto a produtores do comércio paulista.

Os espectros de absorção dos extratos foram obtidos entre 400 e 800 nm, em espectrofotômetros Biotech Pharmacia Ultrospech 2000 e HP 8452A Diode Array, com cubetas de quartzo 1,0 cm de caminho óptico (Q4-Biocal). Esses espectros foram centrados na média como pré-tratamento e avaliados utilizando-se as ferramentas de PCA e KNN do programa *Pirouette 4.0*.

Resultados e Discussão

A análise de PCA com 5 fatores explica 99,98 % da variância total, sendo que a PC1 explica 94,13 %. A Figura 1 apresenta o gráfico de escores de PC1 vs PC2 onde podem ser observados 6 grupos (A, B, C, D, E e F) que representam respectivamente as amostras de extratos de jabuticaba, amora, amora preta, jussara, jambolão e uva. Vale ressaltar que cada fruta apresenta composição distinta de ACYS individuais⁵ identificadas por HPLC -MS, de acordo com fatores como solo e clima, dentre outros; além de diferentes concentrações de cada antocianina.

Estes aspectos ajudam a explicar a separação dos grupos das diferentes espécies.

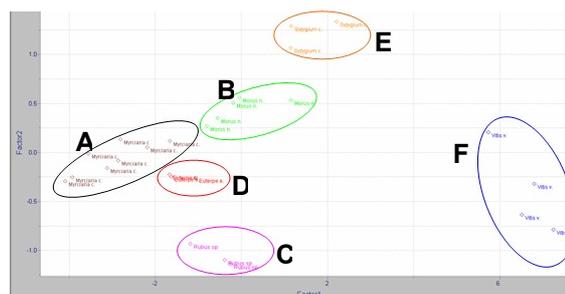


Figura 1. Gráficos de escores para PC1 vs PC2.

Foi aplicado o método de reconhecimento de padrões KNN para criação de um modelo de classificação para as amostras. Os resultados mostraram que com até 2 vizinhos mais próximos o modelo não apresenta erros de classificação, indicando ser robusto. Posteriormente, foi analisado um conjunto de 13 amostras externas, obtendo-se acerto em 85% das amostras. Portanto, o modelo de classificação obtido mostra-se favorável para a caracterização de extratos aquosos de ACYS obtidos de diferentes fontes.

A partir dessas características é possível propor a utilização deste modelo como ferramenta de controle da qualidade dos extratos em processos industriais. Além disso, o modelo introduz a possibilidade de verificar a autenticidade de produtos comercializados com a identificação da procedência de extratos de ACYS.

Conclusões

Os resultados apontam a potencialidade do uso da técnica de espectrofotometria em conjunto com ferramentas quimiométricas para controle de qualidade e autenticidade de extratos de ACYS.

Agradecimentos

Aos fornecedores das amostras.

¹ Harborne, J. B.; The Flavonoids: advanced in research since 1986, Chapman and Hall: New York, 5th ed. **1994**.

² Favaro, M. M. A.; Dissertação de Mestrado, IQ- Unicamp, Campinas, **2008**.

³ Urbano, M.; Castro, M. D. L.; Pérez, P. M.; García-Olmo, J.; Gómez-Nieto, M. A.; *Food Chemistry*, **2006**, 97(1), p. 166.

⁴ Rijke, E.; Zappey, H.; Ariese, F.; Gooijer, C.; Brinkman, U. A. T.; *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, **2004**, 378(4), p. 995.

⁵ Sampaio, P. G.; Dissertação de Mestrado, IQ- Unicamp, Campinas, **2008**.