

Reconhecimento de padrão do envelhecimento de extratos de antocianinas com métodos quimiométricos supervisionados

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, degradação, quimiometria, PCA, KNN.

Introdução

Antocianinas (ACYS) são corantes naturais da classe dos flavonóides sensíveis a variações de temperatura e pH¹ cujos extratos a partir de frutas têm potencialidades diversas de aplicação. A possibilidade de identificar idade e forma de armazenamento de um extrato, a partir da união de medidas espectrofotométricas e quimiometria, permitem definir parâmetros para controle de qualidade e verificar as possibilidades de aplicação. A análise de componentes principais (PCA) e o método do K-vizinho mais próximo (KNN) foram aplicados aos espectros eletrônicos de extratos alcoólicos de jabuticaba (*Myrciaria cauliflora*), armazenados a temperatura ambiente e sob refrigeração por 11 meses para avaliar algumas características de degradação e armazenamento.

Procedimento Experimental

Os extratos alcoólicos foram preparados a partir da imersão das cascas de jabuticaba em etanol 94 % na proporção 1:3 (m/v) a 55 °C por 30 minutos em banho termostatizado¹. As frutas foram obtidas junto a produtores comerciais do estado de São Paulo.

Os espectros eletrônicos entre 200 e 850 nm dos extratos em diversas condições geraram um conjunto de 60 amostras. Utilizou-se um espectrofotômetro Biotech Pharmacia Ultrospech 2000, com cubetas de quartzo de 1,0 cm de caminho óptico (Q4-Biocel) durante 11 meses. Os espectros foram centrados na média como pré-processamento e as amostras foram normalizadas; posteriormente foram aplicadas as ferramentas de PCA e KNN do software Pirouette 4.0.

Resultados e Discussão

Para o conjunto de treinamento com 46 amostras foram realizados estudos de PCA com todo espectro obtido, ou seja, de 200 a 850 nm, tendo sido criado um modelo de classificação com 5 fatores e variância total de 99,49 %. As variáveis com maior poder de modelamento estão entre 400 e 700 nm. Então foi possível reduzir as variáveis e obter um modelo de classificação com 4 fatores e variância total de 99,57 %. Portanto, a redução de variáveis foi favorável ao modelo obtido.

A Figura 1 apresenta o gráfico de escores de PC2 x PC1 do modelo PCA com 4 fatores, onde

podem ser observados quatro grupos (A, B, C e D). Os grupos A e B representam extratos armazenados até cinco meses (mantidos à temperatura ambiente) e oito meses (sob refrigeração), respectivamente. Já os grupos C e D representam extratos armazenados de seis a onze meses (temperatura ambiente) e de nove a onze meses (sob refrigeração).

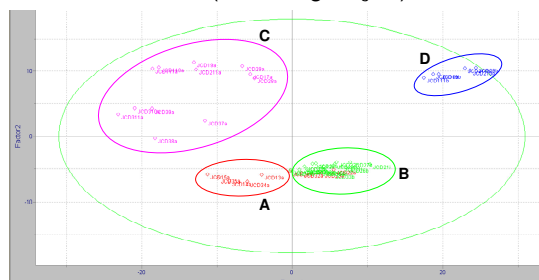


Figura 1: Gráfico de escores para PC2 x PC1

Os resultados obtidos pela primeira componente principal (PC1) permitem identificar as condições de armazenamento dos extratos. Além disso, pode-se prever a idade dos extratos observando-se a separação ocorrida na PC2, o que se relaciona diretamente com fenômenos de estabilização ou degradação. Em extratos jovens, predominam efeitos estabilizadores como copigmentação ou autoassociação. Já em extratos mais velhos, fenômenos de degradação são mais pronunciados e isso deve representar as características que permitem identificá-los dentro um grupo de vários extratos com idades diferentes.

Posteriormente, para avaliar e validar o modelo obtido foi aplicado o método de reconhecimento de padrões, KNN, em um conjunto de 14 amostras externas, obtendo-se acerto em 81,25 % das amostras. Isto indica a relevância da aplicação de ferramentas quimiométricas em dados de espectros eletrônicos para identificação dos extratos de ACYS em termos de degradação e armazenamento.

Conclusões

O modelo de classificação criado com espectros eletrônicos dos extratos, de fácil acesso, fornece informações relevantes sobre a idade e condição de armazenamento desses extratos, o que é relevante para aplicações posteriores.

¹ Favaro, M. M. A.; Dissertação de Mestrado, IQ-UNICAMP, Campinas, 2008.