

Análise de Componentes Principais e K-vizinho mais próximo na identificação de solventes extratores de antocianinas

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, extração, quimiometria, PCA, KNN.

Introdução

Atualmente, observa-se grande interesse no uso de antocianinas (ACYS) como corantes naturais em segmentos distintos, dentre os quais se destacam as indústrias alimentícia, cosmética e farmacêutica.

A obtenção de ACYS a partir de fontes como frutas, por exemplo, pode ser realizada utilizando-se diversos solventes extratores. A aplicabilidade desses extratos está diretamente relacionada com características da extração e do extrato, sendo que o monitoramento espectrofotométrico desses extratos traz informações significativas sobre sua composição de forma prática e acessível¹.

Neste trabalho, demonstramos a identificação da forma de extração de ACYS (solvente) a partir de espectros eletrônicos de extratos de uva (*Vitis vinifera*) com o uso das ferramentas quimiométricas como análise de componentes principais (PCA) e método do K-vizinho mais próximo (KNN).

Procedimento Experimental

As frutas foram obtidas junto a produtores do comércio paulista e os extratos foram preparados a partir da imersão das frutas em três tipos de solventes: aquoso (água corrente), alcoólico (etanol 94 %) e alcoólico acidificado (etanol:ácido acético 1 % (v/v) 85:15 (v/v)), na proporção 1:3 (m/v) em banho termostatizado a 55 °C por 30 minutos¹. Outras três condições também foram variadas: uso exclusivo das cascas da uva; uso de fruta inteira e branqueamento nas condições anteriores².

Os espectros eletrônicos dos extratos foram obtidos entre 400 e 800 nm, no espectrofotômetro Biotech Pharmacia Ultraspec 2000, em celas de quartzo de 1,0 cm de caminho óptico (Q4-Biocel).

O conjunto de treinamento para PCA e KNN foi composto por 36 amostras e o conjunto de validação por 8 amostras externas (401 variáveis). Foi utilizado o *software* Pirouette 4.0 e as ferramentas de PCA e KNN. Os espectros foram centrados na média como pré-processamento e as amostras normalizadas.

Resultados e Discussão

No modelo de PCA com 5 fatores obteve-se explicação de 99,79 % da variância total. O gráfico de *outliers* não indicou a presença dos mesmos considerando distância de Mahalanobis < 16 e resíduo de amostra < 0,05.

O gráfico de escores PC2 x PC1 (Figura 1) indica 3 grupos distintos (A, B e C). Em PC1, nota-se a separação entre extratos obtidos com solvente aquoso (Grupo A) e solventes etanólicos (Grupos B e C). Além disso, a partir de PC2 é possível notar a separação dos extratos em função da acidez: o grupo B traz extratos obtidos com etanol 94 % e o grupo C extratos obtidos com etanol acidificado.

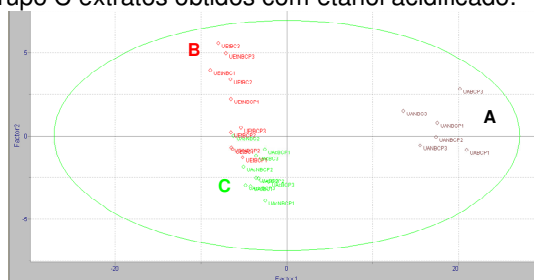


Figura 1: Gráfico de escores para PC2 x PC1

A acidez e a polaridade de solventes extratores têm efeito direto na quantidade de ACYS extraídas e estudos anteriores mostraram que soluções etanólicas fornecem maior quantidade de ACYS quando comparados à aquosa¹.

A Figura 1 também indica que as variações de outras condições de extração não levam a grupos de classificação distintos, indicando pouca contribuição desses fatores para a caracterização de extratos de ACYS.

Posteriormente, foi aplicado o método KNN para criação de um modelo de classificação para as amostras do conjunto de treinamento. O modelo foi validado com um conjunto de 8 amostras externas, obtendo-se acerto em 75 % das amostras.

O modelo de classificação obtido mostrou-se adequado para identificar as condições de extração de ACYS a partir dos espectros eletrônicos dos extratos na região do visível. Os resultados são coerentes com resultados de monitoramentos laboriosos e longos², indicando a adequação do modelo para agilizar a classificação de extratos.

Conclusões

Os resultados apontam a potencialidade da espectrofotometria em conjunto com ferramentas quimiométricas para avaliar a adequação de propostas de obtenção de extratos a partir de estudos rápidos que podem agilizar a otimização de processos industriais.

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

²Sampaio, P.G.; Dissertação de Mestrado, IQ-UNICAMP, Campinas, 2008.