Utilização de PLS na quantificação de adulteração de óleo de oliva extra virgem por oliva puro usando MIR

Rodrigo Santos de Oliveira¹ (IC)^{*}, Rosilene S. Nascimento² (PG), Simone S. O. Borges¹ (PQ), José Bento Borba da Silva² (PQ), Waldomiro Borges Neto¹ (PQ) *rodrigogrand@gmail.com

Palavras Chave: óleo de oliva, adulteração, PLS, Quimiometria.

Introdução

O azeite de oliva representa um pequeno volume da produção mundial de óleos (cerca de 2% do total), mas sua produção contribui com cerca de 15% do valor monetário global¹. Devido seu alto valor agregado, o azeite de oliva vem sendo alvo freqüente de adulterações. Em 2008 pesquisas realizadas na fazenda experimental da Empresa de Pesquisa Agropecuária de Minas Gerais (Epamig) no sul de Minas Gerais, revelaram clima favorável a variedade de oliveiras capazes de produzir azeite puro e de qualidade comercial comparada aos melhores do mundo. Faz-se necessário então um método eficiente para a identificação e quantificação de possíveis amostras adulteradas utilizando PLS (método dos quadrados mínimos parciais) e espectrometria no infravermelho médio.

Resultados e Discussão

Adulteramos amostras de óleos de oliva extra virgem com oliva puro nas concentrações 3% a 18% (m/m), no total de 10 amostras para previsão, e com concentrações de 0,7% a 21% no total de 30 amostras para calibração, obtivemos seus espectros utilizando um espectrômetro de infravermelho da marca Shimadzu modelo IRPrestige-21, com transformada de Fourier e dispositivo amostrador por reflectância atenuada (ATR) com cristal de ZnSe, utilizou-se resolução de 4 cm⁻¹ e 32 varreduras. Para avaliar o modelo utilizamos os valores de RMSEC (raiz quadrada do erro médio de calibração) e RMSEP (raiz quadrada do erro médio de previsão). Foi realizada validação cruzada interna "leave one out" onde cada amostra de calibração foi retirada e prevista pelo modelo.

Na Figura 1 temos o gráfico dos valores das concentrações reais versus os previstos indicando que o modelo foi linear na faixa analisada.

Tabela 1. Resultados do modelo PLS.

	Real	Previsto	Erros
	2,7690	2,7445	0,8833
	4,9030	5,2467	7,0104
	6,3400	6,7884	7,0733
	14,0020	12,3113	12,0749
	18,9240	17,8143	5,8640
	9,7880	9,0754	7,2805
	16,0970	15,7059	2,4296
	17,6890	16,3943	7,3193
	Erro Médio		6,2419
RMSEP	0,9183		
RMSEC	0,5202		
VL's	13		

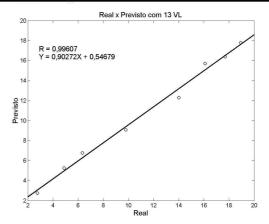


Figura 1. Concentração Real vs. Prevista.

Conclusões

O uso da técnica de Espectrometria na região do Infravermelho Médio e calibração multivariada por PLS quantificou satisfatoriamente o teor da adulteração de oliva extra virgem por oliva de menor valor agregado, sendo assim uma ferramenta eficiente para fiscalização.

Agradecimentos

Ao CNPq e à FAPEMIG pelo apoio financeiro.
¹Aued-Pimentel S, Takemoto E, Kumagai E. E., Cano C. B., *Quim. Nova*, **2008**, 31, 31.

¹ Laboratório de Quimiometria do Triângulo, Instituto de Química, Universidade Federal de Uberlândia, MG

² Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, MG