

Estratégias para classificação de amostras de mel de mesma florada coletados em diferentes localidades analisados por GCxGC.

^aSandra Regina Rivellino (PG), ^{*a}Paulo Henrique Março (PQ), ^bPatrícia Valderrama (PQ), ^aFábio Augusto (PQ). paulohmarco@gmail.com

^aInstituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Caixa Postal 6154, CEP 13083-970, Campinas – SP.

^bCoordenação de licenciatura em química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Caixa Postal 271, CEP 87301-006, Campo Mourão – PR.

Palavras Chave: GCXGC, Mel, MPCA, PLS-DA.

Introdução

Para um estudo de classificação de amostras de mel, tendo em vista a complexidade da mistura, a avaliação da fração volátil pode ser uma escolha viável. Os constituintes orgânicos da mistura podem ser relacionados com o local de coleta das amostras, e com o auxílio de ferramentas quimiométricas, seus cromatogramas poderiam ser usados como impressões digitais. A cromatografia gasosa bidimensional abrangente (GCxGC) representa uma opção para este tipo de matriz porque mesmo em situações nas quais a separação por cromatografia gasosa convencional (GC) é otimizada, é comum que muitos compostos não estejam totalmente resolvidos, podendo ocultar alguns marcadores químicos. Sabendo-se da complexidade dos dados gerados por GCxGC, foram utilizadas diferentes estratégias e métodos quimiométricos de PLS-DA e MPCA para classificar amostras de mel coletadas em diferentes localidades durante a mesma florada de acordo com seus constituintes. Também foi realizada uma seleção de variáveis para que, além de se trabalhar com um número reduzido de variáveis, verificar sobre a veracidade dos resultados. Para a aplicação dos métodos de classificação, fez-se um alinhamento prévio das matrizes de dados. As estratégias e os métodos aplicados possibilitaram a separação e agrupamento das amostras mais similares, mostrando que a metodologia pode ser aplicada em dados de alta complexidade.

Resultados e Discussão

A primeira estratégia utilizada foi o alinhamento dos cromatogramas, realizado por software desenvolvido na Unicamp. Em seguida, as matrizes de dados foram desdobradas na forma de vetores, e foram feitos testes de região de trabalho, como trabalhar-se com a matriz inteira e cortando-se regiões que apresentaram intensidade muito elevada, como a região do solvente, por exemplo. Na sequência, foram aplicados métodos de classificação como o MPCA e PLS-DA, e em seguida fez-se uma seleção de variáveis para trabalhar apenas nas regiões de maior informação a respeito da variância dos dados. A **Tabela 1** apresenta a procedência das amostras de mel de florada de marmeleiro assim como o número das amostras, e a **Figura 1** apresenta os

resultados da classificação feita por MPCA. Os resultados obtidos foram idênticos para PLS-DA e o mesmo foi observado após a seleção de variáveis, confirmando os resultados obtidos por MPCA.

Tabela 1. Procedência das amostras de mel

nº	coleta	local	Município
(1,2) 15	28/03/08	Saco dos polidórios	Brasileira-PI
(3,4) 17	28/03/08	Saco dos polidórios	Brasileira-PI
(5,6) 18	28/03/08	Saco dos polidórios	Brasileira-PI
(7,8) 38	06/04/08	Comunidade Birindibinha	Cocal-PI
(9,10) 58	02/05/05	C. Tanque Velho	São Braz-PI
(11) 59	02/05/08	C. Baixão do Junco	Caracol-PI
(12,13,14) 60	03/05/08	C. São Vitor	São Raimundo Nonato-PI
(15,16) 61	03/05/08	C. São Vitor	São Raimundo Nonato-PI
(17,18,19) 62	03/05/08	C. Poldrinho	São Raimundo Nonato-PI
(20,21) 64	03/05/08	C. Queimada da Roça	São Lourenço-PI
(22,23) 65	03/05/08	C. Queimada da Roça	São Lourenço-PI
(24,25) 66	03/05/08	C. Queimada da Roça	São Lourenço-PI
(26,27) 79	16/05/08	-	Picos-PI
(28-31) 80	16/05/08	-	Picos-PI

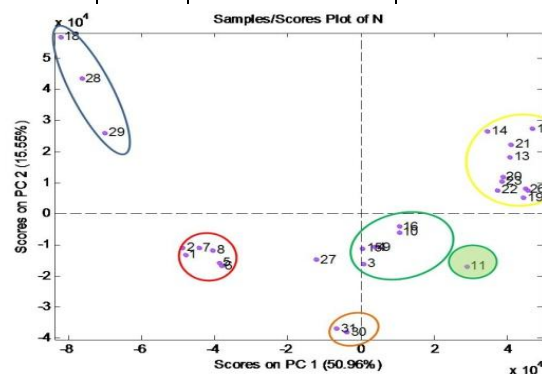


Figura 1. Classificação das amostras por MPCA

Conclusões

Os resultados mostraram que os métodos aplicados apresentaram boa eficiência na classificação das amostras, sugerindo que mesmo amostras provenientes de localidades vizinhas podem apresentar composição diferente e em alguns casos, localidades mais distantes apresentar composição similar.

Agradecimentos

Os autores agradecem a CAPES (Programa PNPD), CNPQ e Embrapa.