

Classificação de óleos vegetais comerciais por infravermelho médio e análise discriminante por quadrados mínimos parciais (PLS-DA)

Vitor de Araújo Freitas (IC), Thiago de Melo Costa Pereira (PQ) e Juliano Souza Ribeiro (PQ)*

Instituto Federal do Espírito Santo - Campus Vila Velha - Avenida Ministro Salgado Filho, s/nº - Bairro Soteco – 29106-010 – Vila Velha – ES *e-mail: julianoribeiro@ifes.edu.br

Palavras Chave: Óleos vegetais comerciais, infravermelho médio e PLS-DA

Introdução

Nos últimos anos a busca por produtos industrializados de qualidade diferenciada e benéficos para a saúde tem se intensificado entre os consumidores. Em se tratando de óleos vegetais (OV), a composição química quanto aos ácidos graxos existentes (saturados, monoinsaturados e poli-insaturados) e o tempo de uso (fritura) dos mesmos implicam na formação de compostos tóxicos que podem contribuir para o desenvolvimento de doenças cardiovasculares, neoplasias e envelhecimento precoce.

O objetivo deste trabalho foi discriminar 5 classes de OV comerciais (azeite, soja, canola, milho e girassol) utilizando o infravermelho médio (IV) e a análise discriminante por quadrados mínimos parciais (PLS-DA). Das 44 amostras analisadas, 34 foram de marcas e matrizes diferentes e 10 de lotes distintos.

Os espectros de IV foram coletados em um espectrômetro Perkin Elmer modelo Spectrum BX 79589, usando 20 varreduras entre 4000 - 400 cm^{-1} , com 2 cm^{-1} de resolução. Todas as amostras foram analisadas em triplicata.

Resultados e Discussão

O melhor modelo PLS-DA foi construído utilizando-se a 1ª derivada dos espectros originais. As variáveis selecionadas foram obtidas utilizando-se o algoritmo OPS e análise visual dos dados.¹

Tabela 1. Resultados da classificação dos óleos vegetais analisados por infravermelho médio.

Classes	Acertos	Falso positivo	Falso negativo	Sel. %	Esp. %
Azeite (1)	42/42	1	0	100	97,7
Soja (2)	32/33	7	1	96,7	82
Canola (3)	21/21	1	0	100	95,5
Milho (4)	15/18	6	3	83,3	71,4
Girassol (5)	15/18	19	3	83,3	44,1

A Tabela 1 apresenta os resultados de classificação obtidos na etapa de validação cruzada do modelo PLS-DA construído com 5 variáveis latentes. As figuras de mérito (seletividade e especificidade) foram calculadas com os resultados obtidos.

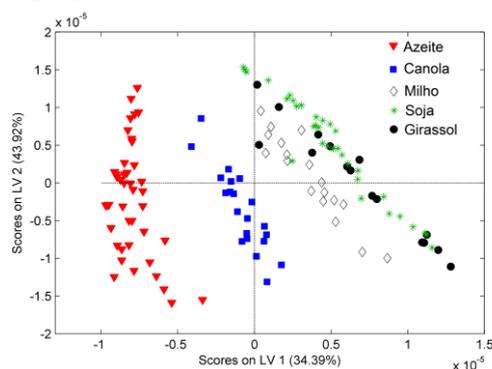


Figura 1. Gráfico de scores de LV1 vs LV2.

De acordo com a 1ª variável latente (LV1) indicada na Figura 1, é possível observar a discriminação de 3 classes de OV (azeite, canola e milho) além da sobreposição de outras duas classes (soja e girassol). A análise dos pesos em LV1 demonstrou que a região espectral de 3025 - 3001 cm^{-1} (carbonos insaturados - sp^2) é a principal responsável pela separação das classes (Peso +).

Segundo a TACO², a porcentagem de AG mono e poli-insaturados em óleos vegetais é:

Tabela 2. Porcentagem de AG em diferentes OV.

	Azeite	Canola	Milho	Soja	Girassol
Mono-insaturados	75,5%	62,6%	33,4%	23,3%	25,5%
Poli-insaturados	9,5%	28,4%	50,9%	60%	62,4%

A disposição das classes em LV1 (Figura 1) apresenta uma boa associação com a composição de AG mono e poli-insaturados mostrados pela literatura, havendo inclusive sobreposição nas amostras que possuem perfis semelhantes de AG.

Conclusões

O modelo PLS-DA construído com 5 variáveis latentes mostrou-se bastante satisfatório para distinguir as classes de óleos vegetais analisadas.

Agradecimentos

FAPES

¹ Teófilo, R. F.; Martins, J. P. A. e Ferreira, M. M. C. *J. Chemometr.* **2009**, 23, 32.

² Tabela Brasileira de Composição de Alimentos – TACO – 2ª edição, **2006**, 62.