

Quantificação de Adulteração por Óleo de Girassol em Óleo de Linhaça Extravirgem utilizando PLS e HATR-MIR

Edvando Souza Teles¹(PG)*, Letícia Maria de Souza¹(PG), Felipe Bachion Santana¹(PG), Hery Mitsutake¹(PG), Waldomiro Borges Neto¹(PQ) edvandoteles@iqufu.ufu.br

¹ Laboratório de Quimiometria do Triângulo, Instituto de Química, Universidade Federal de Uberlândia, Campus Santa Mônica, 38408-100, Uberlândia; MG.

Palavras Chave: PLS, Óleo de Linhaça, HATR-MIR.

Introdução

O óleo de linhaça é um alimento rico em Tocoferol e outros antioxidantes, sendo que seu consumo trás benefícios a saúde humana¹. O óleo de linhaça extravirgem pode ser alvo de adulterações por adição de outros óleos de menor valor agregado, como óleo de girassol refinado.

A espectroscopia de infravermelho médio (MIR) aliada ao modelo de Calibração Multivariada de Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS) tem sido utilizada como um método analítico, que fornece resultados de quantificação satisfatórios, aplicados no controle de qualidade de alimentos². No presente trabalho, foi construído um modelo PLS, com a finalidade de quantificar adulterações de óleo de linhaça extravirgem por óleo de girassol, a partir de espectros MIR, conforme as recomendações presentes na norma ASTM E1655-05.

Resultados e Discussão

Preparou-se as amostras utilizando óleo de linhaça extravirgem e óleo de girassol refinado. Foram preparadas 63 amostras de óleo de linhaça extravirgem, adulteradas com proporções conhecidas de óleo de girassol refinado, em proporção de 0,5%(m/m) a 30%(m/m).

Obteve-se espectros de MIR em espectrômetro FT-IR SpectrumTwo (Perkin Elmer) utilizando HATR-ZnSe de 4000 a 600 cm^{-1} , resolução 4 cm^{-1} e 16 varreduras por espectro. Foram obtidos espectros de MIR em triplicata para cada amostra.

Os espectros obtidos tiveram suas linhas de base corrigidas utilizando Baseline e foram analisados com PLS toolbox 3.5 (Eigenvector Research) em ambiente MATLAB 6.1 (MathWorks Inc.). O conjunto de dados foi centrado na média e dividido, de forma que 49 amostras para o conjunto de calibração e 28 para o conjunto de previsão.

A eficiência de previsão do modelo, construído com 6 variáveis latentes (V. L.) foi analisada avaliando os valores de RMSEC, RMSECV, RMSEP e através da determinação dos coeficientes de validação cruzada (R^2_{cal}) e de validação (R^2_{val}). Os valores de Q residual e leverage foram utilizados para a

determinação de outliers, aplicando um limite de confiança de 95%.

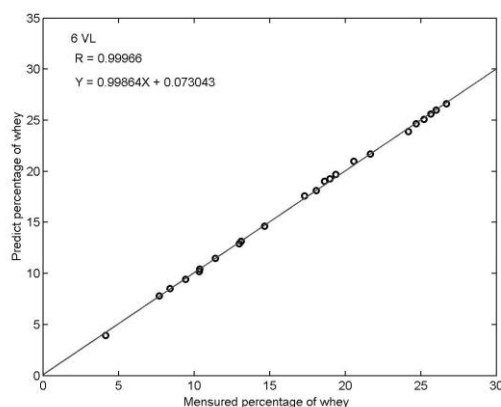


Figura 1. Valores de proporção de óleo de girassol refinado reais contra previstos pelo modelo PLS em amostras de óleo de linhaça extravirgem.

Tabela 1. Resultados de erros do modelo PLS para amostras de óleo de linhaça extravirgem, adulteradas com óleo de girassol refinado.

V. L.	RMSEC	RMSECV	RMSEP	E.M.	R ²
06	0,1158	0,1613	0,1840	0,9851	0,99966

Conclusões

O modelo PLS construído, conforme a norma ASTM E1655-05, mostrou-se eficiente na quantificação de óleo de girassol refinado em amostras de óleo de linhaça extravirgem, podendo ser empregado no controle de qualidade deste alimento.

Agradecimentos

Os autores agradecem a CAPES e a FAPEMIG pelo apoio financeiro.

¹ Hoz L., et al., Effect of dietary linseed oil and a-tocopherol on pork tenderloin (Psoas major) muscle, Meat Science 65, 1039–1044, 2003.

² Kartheek, M., Smith, et al., Determination of adulterants in food: A review. Journal of Chemical and Pharmaceutical Research, 3, 629–636. 2011.