

MÉTODOS QUIMIOMÉTRICOS APLICADOS EM ESPECTROSCOPIA MIR PARA A CLASSIFICAÇÃO DE MÉIS

Ellisson H. de Paulo^{a*}, Márcia H. C. Nascimento^a, Pedro H. P. da Cunha^a, Emanuele C. S. Oliveira^b, Paulo R. Filgueiras^a.

^aUniversidade Federal do Espírito Santo, Avenida Fernando Ferrari, 514, Goiabeiras – 29075-910 – Vitória-ES, Brasil. *ellisson.hp@gmail.com, marcia.cassago@gmail.com, pedrophenrique@hotmail.com, filgueiras.pr@gmail.com.

^bInstituto Federal do Espírito Santo, Avenida Elizabeth Minete, 500, São Rafael – 29375-000 – Venda Nova do Imigrante-ES, Brasil. emanuele.oliveira@ifes.edu.br.

Palavras Chave: Mel, infravermelho, classificação, seleção de variáveis.

O mel é uma substância natural produzida do néctar das flores a partir da evaporação da água e da adição de enzimas pelas abelhas [1]. A composição do mel influencia diretamente nas características físico-químicas e seu conhecimento é de fundamental importância para a melhoria da qualidade. Contudo, algumas características podem tornar este processo desvantajoso. Como alternativa, é possível utilizar métodos espectroscópicos como o infravermelho (IV), que é capaz de produzir muita informação química sobre as amostras [2]. Entretanto, uma análise considerando a variabilidade natural das amostras de mel requer métodos quimiométricos. Para uma análise discriminante podem-se utilizar métodos quimiométricos como a seleção de preditores ordenados (OPS) [3] para a seleção de variáveis e os mínimos quadrados parciais com análise discriminante (PLS-DA) para classificação. O OPS seleciona um subconjunto de variáveis a partir da matriz original quando sequencia as variáveis por ordem de importância. A partir disso, o PLS-DA pode ser aplicado no novo conjunto para discriminar as amostras através de suas similaridades. Neste estudo, o OPS e PLS-DA foram utilizados para discriminar 84 amostras de méis do estado do Espírito Santo a partir do teor de cinzas, sacarose aparente e umidade. Para isso, as informações de IV foram organizadas em uma matriz de dados e as características físico-químicas em vetores. Para cinzas, a exatidão de previsão foi de 0,708 e 0,75 para PLS-DA e OPS-PLS-DA, respectivamente. Para sacarose aparente, a exatidão para PLS-DA foi de 0,666 e para OPS-PLS-DA foi de 0,875. E para umidade, a exatidão foi de 0,5 e 0,625 PLS-DA e OPS-PLS-DA, respectivamente. A seleção de variáveis reduziu o conjunto original de 1.798 variáveis para 100, 130 e 35 para cinzas, sacarose aparente e umidade, respectivamente. Os modelos indicaram que a seleção de variáveis pode melhorar as métricas quando reduz a quantidade de variáveis.

Referências:

1. Svečnjak et al. *Agriculturae Conspectus Scientificus*. 76. 191-195, **2011**.
2. Kuballa et al. *Current Opinion in Food Science*, 19, 57-62, **2018**.
3. Roque et al. *Analytica Chimica Acta*, 1075, 57-70, **2019**.

Agradecimentos: Labpetro-UFES, IFES, CAPES e FAPES