ANÁLISE DISCRIMINANTE POR MÍNIMOS QUADRADOS PARCIAIS (PLS-DA) ACOPLADA A ESPECTROSCOPIA COMO FERRAMENTA PRECURSORA DE DETECÇÃO DE FRAUDE EM VINAGRES ORGÂNICOS

II SEMINÁRIO CADEIA PRODUTIVA DE ALIMENTOS E PRODUTOS ORGÂNICOS, 2ª edição, de 02/03/2023 a 03/03/2023
ISBN dos Anais: 978-65-5465-022-9

MASCARELI; Vinícius Avanzi Barbosa [1], GALVAN; Diego [2], FLORA; Rebeca Priscila Catarino [3], COSTA; Viviane Lopes Leite da [4], SILVA; Jaquellyne Bittencourt Moraes Duarte da [5], SPINOSA; Wilma Aparecida [6]

RESUMO

O vinagre é caracterizado como o produto do fermentado acético obtido de matéria-prima rica em açúcares fermentescíveis ou amido. Em sua composição estão presentes majoritariamente o ácido acético e a água, e em menores proporções, compostos bioativos como ácidos orgânicos e açúcares. A qualidade e o preço dos vinagres variam principalmente de acordo com os compostos presentes no produto e pelas etapas envolvidas em sua produção. Uma das características que atribuem um maior valor agregado ao fermentado acético é o tipo agronômico de produção da matéria-prima. O vinagre orgânico geralmente é atrativo para quem busca uma alimentação com dieta mais saudável e eco sustentável. Seu alto valor agregado gera abertura a práticas de fraude por divulgação de informação falsa. O combate à fraude em alimentos é cada vez mais exigente em relação as análises utilizadas para sua detecção, e a quimiometria, mais especificamente análises multivariadas, têm-se mostrado uma boa alternativa para combatê-la.. Sendo assim, o objetivo deste trabalho dá-se pelo interesse em classificar amostras de vinagres entre orgânicos e convencionais via análise discriminante por mínimos quadrados parciais (PLS-DA) acoplado a técnicas espectroscópicas, de maneira precursora a detecção de fraude em vinagres orgânicos. Foram obtidos espectros de ^{1}H-RMN, FTIR-ATR, UV-Vis e FT-NIR de 80 amostras de vinagres, sendo 46 orgânicos e 34 convencionais de diversos tipos de frutas ou álcool. Os espectros foram submetidos a 387 possibilidades de diferentes tratamentos e pré-processamentos para estimar o melhor desempenho de classificação. Para a seleção das amostras foi utilizado o algoritmo de Kennard & Stone, sendo 67% das amostras para calibração, 33% para predição. Os modelos de PLS-DA foram construídos e o número de variáveis latentes definido através da raiz do erro quadrático médio da validação cruzada performado por validação cruzada *leave-ne-out*. Os modelos foram avaliados a partir das figuras de mérito: sensibilidade (SEN), especificidade (SPE), acurácia (ACC) e pelo coeficiente de correlação de Matthews (MCC). Os resultados demonstraram que o modelo para a técnica de ^{1}H-RMN, com 7 variáveis latentes, tratamento e pré-processamento de normalização 1, alinhamento e escala de pareto, tiveram melhor desempenho analítico para predição das classes. Valores de SPE de 90,9%; SEN de 93,3%; ACC de 92,3% e MCC de 0,84 foram registrados. Seguido dos desempenhos das técnicas de FT-IR, UV-Vis e por último FT-NIR, com o pior modelo de predição (SPE de 63,6%; SEN de 73,7%; ACC de 69,2 e MCC 0,37). Estes resultados demonstraram que a combinação de técnicas espectroscópicas com o método de PLS-DA são uma alternativa para realizar a classificação de vinagres pelo método agronômico de cultivo da matéria-prima. Sendo assim, indicam a viabilidade para futuras aplicações em diferenciação de vinagres orgânicos dos convencionais em casos de detecção de fraude. Agradecimentos ao CNPq pelo fomento, ao Laboratório de análise de

[1] Universidade Estadual de Londrina , vini.mascareli@gmail.com
[2] Universidade Federal do Mato Grosso do Sul, diegogalvann@gmail.com
[3] Universidade Estadual de Londrina, rebeca.catarino@uel.br
[4] Universidade Estadual de Londrina , vivianel.l.costa@gmail.com
[5] Universidade Estadual de Londrina, jaquellyne.bitten@uel.br
[6] Universidade Estadual de Londrina, wilma.spinosa@uel.br

alimentos, DCTA e LABSPEC da Universidade Estadual de Londrina, NAL-UFRJ e colegas, pelo auxílio.

PALAVRAS-CHAVE: análise multivariada, quimiometria, produto orgânico, fermentado acético

[1] Universidade Estadual de Londrina , vini.mascareli@gmail.com
[2] Universidade Federal do Mato Grosso do Sul, diegogalvann@gmail.com
[3] Universidade Estadual de Londrina, rebeca.catarino@uel.br
[4] Universidade Estadual de Londrina , vivianel.l.costa@gmail.com
[5] Universidade Estadual de Londrina, jaquellyne.bitten@uel.br
[6] Universidade Estadual de Londrina, wilma.spinosa@uel.br