

DESENVOLVIMENTO DE UM MÉTODO RÁPIDO PARA CLASSIFICAÇÃO E AUTENTICAÇÃO DE AMOSTRAS DE PRÓPOLIS UTILIZANDO ESPECTROSCOPIA DE INFRAVERMELHO MÉDIO E QUIMIOMETRIA

XIV Seminário Paranaense de Meliponicultura I Concurso Paranaense de Qualidade em Méis de Abelha-Sem-Ferrão., 1ª edição, de 14/04/2021 a 30/04/2021
ISBN dos Anais: 978-65-86861-68-6

SUREK; Monica ¹, COBRE; Alexandre de Fátima ², FACHI; Mariana Millan ³, PONTAROLO; Roberto ⁴, SOUZA; Wesley Maurício de ⁵

RESUMO

Introdução. A própolis é uma mistura complexa, que varia de acordo com a flora da região e a espécie de abelha que o produz, utilizado como remédio tradicional e na indústria e que necessita de métodos acessíveis que permitam sua autenticação. **Objetivo.** O presente estudo teve como objetivo desenvolver e validar um modelo quimiométrico por infravermelho médio (IVM) para fins de classificação e autenticação de amostras de própolis. **Método.** Extratos brutos de própolis obtidos de quatro espécies de abelhas (*Apis mellifera scutellata*, *Melipona quadrifasciata quadrifasciata*, *Scaptotrigona bipunctata* e *Plebeia remota*) foram analisados por IVM. Após a aquisição dos espectros, os dados foram submetidos ao tratamento quimiométrico por análise de componentes principais (PCA) e análise discriminante por mínimos quadrados parciais (PLS-DA). O método PCA foi utilizado como análise exploratória para detecção de amostras *outliers*, discriminação entre os extratos e identificação da relação entre as variáveis. O modelo PLS-DA foi construído para permitir a classificação e previsão das amostras. A validação do modelo PLS-DA, foi realizada avaliando-se os parâmetros sensibilidade, especificidade, acurácia e Coeficiente de Correlação de Matthew (CCM). **Resultados.** A matriz dos dados era composta por um total de 640 amostras, sendo 160 pertencentes a cada tipo de própolis. Todos os modelos (PCA e PLS-DA) foram construídos utilizando-se pré-processamento *mean center*. O modelo PCA utilizou dois componentes principais totalizando 96.2% de variância e discriminou as amostras dos quatro tipos de própolis, sendo que as regiões espectrais de 800-1010 cm^{-1} , 1400-1600 cm^{-1} e 1600-3100 cm^{-1} foram as responsáveis por essa separação. Antes da construção do modelo final do PCA, 10 amostras consideradas *outliers* foram detectadas e removidas da base de dados. O modelo PLS-DA foi construído pelo método de validação cruzada *leave-one-out*, utilizando 5 variáveis latentes, o que representa 99.76% e 74.40% das variâncias acumuladas dos blocos X e Y, respectivamente. Os valores de root mean square error of cross-validation (RMSECV) e root mean square error of calibration (RMSEC) foram de 0.25 para os quatro tipos de extratos, já para root mean square error of prediction (RMSEP) foram de 0.28, 0.27, 0.24 e 0.20 para *M. quadrifasciata quadrifasciata*, *P. remota*, *S. bipunctata* e *A. mellifera scutellata*, respectivamente. Todas as amostras das quatro classes de extratos foram corretamente classificadas pelo modelo PLS-DA. O modelo teve 100% de sensibilidade, 100% de especificidade e 100% de CCM, mostrando a boa eficiência para previsão

¹ Universidade Federal do Paraná, monicasurek13@gmail.com

² Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacéuticas Paraná, alexandrecoBRE@gmail.com

³ Universidade Federal do Paraná, marianamfachi@gmail.com

⁴ Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacéuticas, pontarolo@ufpr.br

⁵ Universidade Federal do Paraná, wesleysouza@ufpr.br

de amostras futuras. **Conclusão.** O modelo PLS-DA construído mostrou-se sensível e específico. Portanto, esse modelo pode ser usado como uma ferramenta para classificação e autenticação dos extratos destes tipos de própolis.

PALAVRAS-CHAVE: Infravermelho, Própolis, Quimiometria