



Análise multivariada de espectroscopia por infravermelho próximo (NIR) em fibras

Sofia T. Garcia*, Maria Teresa P. S. Clerici, Karine C. Kaufmann, Amanda T. Badaró, Amanda R. Ferreira e Douglas F. Barbin.

Resumo

O objetivo deste trabalho foi utilizar um sistema portátil de espectroscopia de infravermelho próximo associado à análise multivariada como PCA e LDA para caracterizar diferentes tipos de amostras de fibras.

Palavras-chave:

Espectroscopia de infravermelho próximo (NIR), fibra, análise multivariada.

Introdução

Métodos tradicionais de análise comumente empregados na indústria alimentícia se caracterizam por exigirem profissionais treinados, serem demorados e inutilizarem a parte da amostra analisada. Alternativamente, a espectroscopia de infravermelho próximo (NIR) é um método de análise rápido e não destrutivo [1].

Associada à espectroscopia NIR, análises multivariadas buscam extrair informações importantes e prever comportamentos de um conjunto de dados. A análise de componentes principais (PCA) agrupa as amostras de acordo com informações relevantes para o sistema [1], enquanto a análise discriminante linear (LDA) classifica os dados de acordo com a tendência que apresentam [2].

O objetivo desse trabalho foi verificar a aplicabilidade e a eficácia da espectroscopia de infravermelho próximo na classificação de diferentes tipos de fibras.

Resultados e Discussão

Foram obtidas, do Laboratório de Cereais da Faculdade de Engenharia de Alimentos da Unicamp, 7 amostras de diferentes fibras e 1 de semolina, conforme especificações (Tabela 1). Coletou-se 10 espectros de cada amostra com o aparelho Micro NIR portátil, totalizando 80 amostras. Aos dados espectrais aplicou-se o filtro SNV (Padronização Normal de Sinal), apropriado para remover interferências de tamanho de partículas, uma vez que as amostras possuíam diferentes granulometrias. Então, realizou-se o PCA para uma análise exploratória dos dados, conforme a Figura 1 e LDA a fim de classificar as amostras (Tabela 2).

Tabela 1. Composição de cada amostra e seu código correspondente

Código	Composição da amostra
WC 90	Fibra de trigo com 60 µm de tamanho
WC 200	Fibra de trigo com 145 µm de tamanho
S20	80% psyllium e 20% de fibra de celulose
S50	50% psyllium e 50% de fibra de celulose
Q80	20% psyllium e 80% de fibra de bambu
QC90	Fibra de bambu com 60 µm de tamanho
QC200	Fibra de bambu com 145 µm de tamanho
SEM	Semolina

Figura 1. Gráfico do PCA das amostras de fibras.

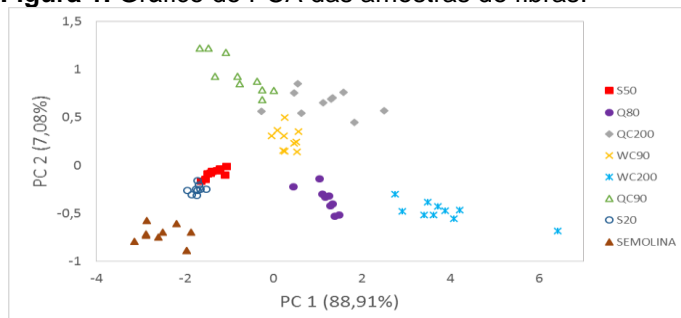


Tabela 2. Matriz de confusão da validação cruzada.

Classes	Sensibilidade %	Exatidão %	Seletividade %	TFP* %
1	90	97,5	98,6	1,45
2	88,9	98,7	100	0
3	80	96,2	98,6	1,45
4	100	97,5	97,1	2,90
5	100	100	100	0
6	90	98,7	100	0
7	100	98,7	98,6	1,45
8	100	100	100	0

*Taxa de falsos positivos

Amostras do mesmo tipo de fibra tenderam a se agrupar, mesmo quando a porcentagem de cada fibra ou a granulometria eram diferentes, com exceção das amostras de fibra de trigo (Figura 1). A matriz de confusão do LDA nos mostra que o método classificou cada tipo de fibra, apresentando altos valores de sensibilidade, exatidão e seletividade, enquanto as taxas de falsos positivos foram próximas de zero.

Conclusões

Após a realização das análises multivariadas como o PCA e LDA, foi possível verificar que a espectroscopia de infravermelho próximo é capaz de diferenciar amostras de fibras e classificá-las de forma rápida e não destrutiva.

Agradecimentos



¹ M. Blanco, I. Villarroya, NIR spectroscopy: a rapid-response analytical tool, *Trends in Analytical Chemistry*, vol 21, 2002, p 240-250.

² Fu, H., Jiang, D., Zhou, R. et al. Predicting mildew contamination and shelf-life of sunflower seeds and soybeans by fourier transform near-infrared spectroscopy and chemometric data analysis, *Food Anal. Methods*, 2017, vol 10, p 1597-1608.