



10º Congresso Interinstitucional de Iniciação Científica – CIIC 2016
02 a 04 de agosto de 2016 – Campinas, São Paulo
ISBN 978-85-7029-135-6

ESTABELECIMENTO DE CURVAS DE CALIBRAÇÃO EM ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO PARA TEORES DE LIPÍDEOS E DE ÁCIDO OLEICO EM FRUTOS DE MACAÚBA

Ingrid Figueiredo **Bittencourt**¹; Maria Manuela H. **Venâncio**²; Luiz Henrique C. **Berton**², Joaquim Adelino de **Azevedo Filho**³, Carlos A. **Colombo**⁴, Cássia R. Limonta **Carvalho**⁵

Nº 16113

RESUMO – A palmeira macaúba, nativa do cerrado brasileiro, é considerada uma alternativa para produção de biocombustíveis, pois seus frutos concentram óleo na polpa e apresentam alto teor de ácido oleico. O objetivo do trabalho foi a elaboração de modelos matemáticos para a predição de óleo e ácido oleico em análises futuras de populações, visando auxiliar o programa de melhoramento da espécie. Frutos de macaúba foram processados, retirando-se as polpas, que foram secas a 30-40°C e moídas. Medidas de reflectância difusa das polpas foram realizadas em espectrofotômetro FOSS NIRSystems, de 1100 a 2498 nm, com os sinais expressos em $\log(1/R)$. Foram determinados os teores de lipídeos das amostras e a composição de ácidos graxos nos óleos usando cromatografia gasosa. A partir desses valores de referência e os espectros gerados, foram construídas curvas de calibração de óleo e de ácido oleico usando método de regressão PLS. Os melhores modelos foram obtidos ao usar como tratamentos matemáticos dos espectros gerados, a normalização, correção multiplicativa de sinal (MSC), primeira derivada (5 pontos) e dados centrados na média. A curva de calibração de lipídeos demonstrou baixos erros de validação interna (0,51%) e de calibração (0,50%), elevados coeficientes de validação interna (0,9996) e de calibração (0,9996) e boa capacidade de predição de resultados confiáveis. Embora a curva de calibração para ácido oleico tenha apresentado alta correlação (0,9463) entre os valores de referência e os preditos, com parâmetros de precisão aceitáveis, o modelo não foi eficiente na predição dos resultados ao usar o conjunto de amostras de validação.

Palavras-chaves: macaúba, lipídeos, ácido oleico, modelo multivariado, predição, seleção de genótipos.

1 Autor, Bolsista CNPq (PIBIC): Graduação em Química, PUCC, Campinas-SP; ingrid.fbittencourt@gmail.com

2 Colaboradores, Bolsistas FAPESP: Centro de Recursos Genéticos Vegetais, Instituto Agronômico, Campinas-SP.

3 Colaborador, Pesquisador científico: DDD/APTA – Pólo Regional do Leste Paulista, Monte Alegre do Sul - SP

4 Colaborador, Pesquisador científico: Centro de Recursos Genéticos Vegetais, Instituto Agronômico, Campinas-SP

5 Orientador, Pesquisadora científica: Centro de Recursos Genéticos Vegetais, Instituto Agronômico, Campinas-SP; climonta@iac.sp.gov.br



10º Congresso Interinstitucional de Iniciação Científica – CIIC 2016
02 a 04 de agosto de 2016 – Campinas, São Paulo
ISBN 978-85-7029-135-6

ABSTRACT – *The macaw palm, native palm in the Brazilian cerrado, is considered an alternative to biofuels production, because its fruits concentrate lipids in pulp and have a high content of oleic acid. The objective of this study was to elaborate mathematical models for the prediction of oil and oleic acid in future analyzes of populations, aiming to assist the program for improvement of the species. Fruits of macaw palm were processed, removing the pulps, which were dried at 30-40°C and milled. Diffuse reflectance measurements of dried and milled pulps were performed in a spectrophotometer FOSS NIRSystems, from 1100 to 2498 nm, with signals expressed in log (1/R). The sample lipid contents were determined and the composition of fatty acids in oils analyzed using gas chromatography. From these reference values and the spectra generated, calibration curves of lipids and oleic acid were built using the PLS regression method. The best models were obtained, when using as mathematical treatment of the generated spectra, normalization, MSC, first derivative (5 points) and mean-center. The lipid calibration curve showed low internal validation errors (0.51%)*

and of the calibration (0.50%), high internal validation coefficient (0,9996), high calibration coefficient (0,9996) and good ability to predict reliable results. Although the calibration curve for oleic acid has shown high correlation (0,9463) between the reference values and the predicted, with acceptable precision parameters, the model was not efficient in the prediction of results.

Keywords: macaw palm, lipids, oleic acid, multivariate model, prediction, selection of genotypes.