

AVALIAÇÃO DA AUTENTICIDADE DE UÍSKES UTILIZANDO INSTRUMENTAÇÃO PORTÁTIL E FERRAMENTAS QUIMIOMÉTRICAS

Camila Cacique Trindade (PG)*

Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Av. Antônio Carlos, 6627 – Pampulha – Belo Horizonte/MG – CEP 31.270-901.

Ana Carolina Fulgêncio (PG)

Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Av. Antônio Carlos, 6627 – Pampulha – Belo Horizonte/MG – CEP 31.270-901.

Pablo Alves Marinho (PC)

Instituto de Criminalística da Polícia Civil de Minas Gerais (ICPC/MG), Rua Juiz de Fora, 400 – Barro Preto – Belo Horizonte/MG – CEP 30.180-060.

Rogério Araújo Lordeiro (PC)

Instituto de Criminalística da Polícia Civil de Minas Gerais (ICPC/MG), Rua Juiz de Fora, 400 – Barro Preto – Belo Horizonte/MG – CEP 30.180-060.

Marcelo Martins de Sena (PQ)

Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Av. Antônio Carlos, 6627 – Pampulha – Belo Horizonte/MG – CEP 31.270-901.

Mariana Ramos Almeida (PQ)

Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Av. Antônio Carlos, 6627 – Pampulha – Belo Horizonte/MG – CEP 31.270-901.

RESUMO

O consumo de bebidas alcoólicas é costume entre várias culturas ao redor do mundo, o que torna esse tipo de produto alvo de processos de adulteração a fim de obter vantagem financeira. A falsificação de bebida alcoólica ocorre principalmente em bebidas com alto valor comercial, como uísques. A ingestão de bebidas falsificadas oferece risco à saúde, sendo um problema fiscal e de saúde pública. Devido aos recorrentes casos de corrupção, adulteração e falsificação de bebidas alcoólicas que são noticiados na imprensa, centra-se este trabalho no desenvolvimento de um modelo quimiométrico supervisionado *Partial Least Squares Discriminant Analysis* (PLS-DA) empregando dados de espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) para discriminar amostras autênticas e falsificadas de uísques. Para o desenvolvimento do trabalho foram realizadas medidas no infravermelho próximo (NIR) de 30 amostras de uísques apreendidos pela Polícia Civil do Estado de Minas Gerais (PCMG) entre junho de 2021 a agosto de 2022 e de 30 amostras autênticas de origens distintas. Os espectros foram obtidos em um espectrômetro portátil MicroNIR® 1700ES, com a faixa de trabalho de 950 a 1650 nm, fabricado pela Viavi Solution (Milpitas, CA, EUA). Para a construção do modelo PLS-DA, o conjunto de dados foi dividido em dois, um conjunto de treinamento (40 amostras) e um conjunto teste (20 amostras), empregando o algoritmo de Kennard-Stone¹. Alcançou-se o modelo discriminante com melhor desempenho ao aplicar como pré-processamento: (i) filtro de *alisamento* com sete janelas, (ii) SNV (Standard Normal Variate) e (iii) dados centrados na média. Quatro variáveis latentes (VLs) foram escolhidas na validação cruzada empregando o método dos subconjuntos aleatórios, e correspondem a 92,08% e 74,19% da variância em X e y, respectivamente. O modelo PLS-DA apresentou 90,5% de confiabilidade para o conjunto teste com taxa de falso positivo e falso negativo iguais a, respectivamente, 6,25% e 3,23% e taxas de sensibilidade e especificidade maiores que 90%, demonstrando que o modelo construído com os dados de NIR é adequado para discriminar amostras de uísques autênticos e falsificados. A técnica NIR é vantajosa por ser de baixo custo, não destrutiva, não poluente e por não requerer o preparo prévio das amostras para a aquisição das medidas². Ademais, a portabilidade do equipamento favorece seu uso e transporte em situações externas aos laboratórios periciais.

PALAVRAS-CHAVE: PLS-DA, espectroscopia NIR, fraude de bebidas alcoólicas.

REFERÊNCIAS

- 1-R. W. Kennard & L. A. Stone (1969) Computer Aided Design of Experiments, *Technometrics*, 11:1, 137-148.
2-Pasquini, C. Near infrared spectroscopy: A mature analytical technique with new perspectives – A review. *Analytica Chimica Acta*, 1026 (2018), p. 8-36.

*caciquecamila@yahoo.com.br

