

PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA DE GOIÁS
ESCOLA DE CIÊNCIAS EXATAS E DA COMPUTAÇÃO
GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE COMPUTAÇÃO



**DETERMINAÇÃO DE CONCENTRAÇÃO DE PRINCÍPIOS ATIVOS EM
CINNAMOMUM VERUM UTILIZANDO IMAGENS HIPERESPECTRAIS**

GIDEON DA SILVA SANTOS

GOIÂNIA

2020

GIDEON DA SILVA SANTOS

**DETERMINAÇÃO DE CONCENTRAÇÃO DE PRINCÍPIOS ATIVOS EM
CINNAMOMUM VERUM UTILIZANDO IMAGENS HIPERESPECTRAIS**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Escola de Ciências Exatas e da Computação, da Pontifícia Universidade Católica de Goiás, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Bacharel em Engenharia de Computação.

Orientador (a): Prof. Dr. Clarimar José Coelho.

Coorientador (a): Prof. Dr. Arlindo Rodrigues Galvão Filho.

GOIÂNIA

2020

GIDEON DA SILVA SANTOS

**DETERMINAÇÃO DE CONCENTRAÇÃO DE PRINCÍPIOS ATIVOS EM
CINNAMOMUM VERUM UTILIZANDO IMAGENS HIPERESPECTRAIS**

Este Trabalho de Conclusão de Curso julgado adequado para obtenção do título de Bacharel em Engenharia de Computação, e aprovado em sua forma final pela Escola de Ciências Exatas e da Computação, da Pontifícia Universidade Católica de Goiás, em ___/___/_____.

Prof. Ma. Ludmilla Reis Pinheiro dos Santos,
Coordenador (a) de Trabalho de Conclusão de Curso

Banca examinadora:

Orientador (a): Prof. Dr. Clarimar José Coelho

Coorientador (a): Prof. Dr. Arlindo Rodrigues
Galvão Filho

Ms. Isaac Yves Lopes de Macêdo

GOIÂNIA

2020

RESUMO

Este trabalho trata sobre a determinação de concentração de princípios ativos em *Cinnamomum verum*. O objetivo deste trabalho é determinar a concentração dos princípios ativos Ácido gálico, Catequina e Resveratrol, em amostras de *Cinnamomum verum*, utilizando imagens hiperespectrais. A determinação da concentração dos princípios ativos é realizada pelos métodos de Mínimos Quadrados Parciais e Análise Discriminante (*Partial Least Squares Discriminant Analysis*, PLS-DA). Foram criados três modelos PLS-DA para os princípios ativos Ácido gálico, Catequina e Resveratrol, os modelos obtiveram acurácias de 95.40%, 90.79% e 86.72%, respectivamente. Através dos resultados obtidos é possível confirmar que a determinação da concentração de princípios ativos pode ser realizada utilizando imagens hiperespectrais.

Palavras-chave: *Cinnamomum verum*, Princípios ativos, Imagem hiperespectral, Mínimos quadrados parciais e Análise discriminante.

ABSTRACT

This work deals with the determination of concentration of active compounds in *Cinnamomum verum*. The goal of this work is to determine the concentration of the active compounds Gallic acid, Catechin and Resveratrol, in samples of *Cinnamomum verum*, using hyperspectral images. The determination of the concentration of the active compounds is performed by the methods of Partial Least Squares and Discriminant Analysis (PLS-DA). Three PLS-DA models were created for the active principles Gallic acid, Catechin and Resveratrol, the models obtained accuracy of 95.40%, 90.79% and 86.72%, respectively. Through the results obtained it is possible to confirm that the determination of the concentration of active compounds can be performed using hyperspectral images.

Keywords: *Cinnamomum verum*, Active compounds, Hyperspectral imaging, Partial least squares and Discriminant analysis.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	6
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	7
2.1	Princípios ativos	8
2.1.1	<i>Ácido gálico</i>	8
2.1.2	<i>Catequina</i>	9
2.1.3	<i>Resveratrol</i>	10
2.2	Imageamento hiperespectral	10
2.3	Quimiometria.....	11
2.3.1	<i>Análise de Componentes Principais</i>	12
2.3.2	<i>Mínimos Quadrados Parciais e Análise Discriminante</i>	12
3	MATERIAIS E MÉTODOS.....	14
3.1	Princípios ativos (padrões) e amostras de canela	14
3.2	Pré-processamento dos dados	15
3.3	Análise de Componentes Principais	16
3.4	Mínimos Quadrados Parciais e Análise Discriminante	17
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	19
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	21
	REFERÊNCIAS	22

1 INTRODUÇÃO

Princípios ativos são compostos químicos responsáveis por exercerem efeito biológico. Podem ser encontrados em alimentos e plantas. O uso de plantas medicinais para o tratamento de doenças é um dos métodos mais antigos empregados pelo homem, essa prática como ação terapêutica é algo que sempre existiu na humanidade (MORAES; SANTANA, 2001). Segundo Lopes et al. (2005), denomina-se fitoterapia todo tipo de tratamento feito a partir de plantas medicinais, e fitoterápicos como medicamentos produzidos a partir dessas plantas. O isolamento de princípios ativos em plantas medicinais tem ganhado importância pelo seu potencial positivo no desenvolvimento de novos medicamentos contra várias doenças, incluindo câncer, diabetes e suas complicações secundárias (PITCHAI et al., 2010).

Cinnamomum verum conhecida também por canela verdadeira é uma planta medicinal que tem sido usada como um agente promotor da saúde para o tratamento de doenças. A canela contém princípios ativos que são responsáveis pelos seus efeitos benéficos à saúde. A canela possui potentes efeitos neuroprotetores, hepatoprotetores, cardioprotetores, e gastroprotetores decorrente das suas propriedades antioxidantes e antiinflamatórias (NABAVI et al., 2015).

A análise de imagens hiperespectrais vem se tornando uma prática madura que oferece grandes vantagens para análises quantitativas e qualitativas, de modo rápido e não destrutivo. Devido ao potencial das imagens hiperespectrais, essa técnica tem sido aplicada em conjunto com a quimiometria para a análise de plantas medicinais (TÜRKER-KAYA; HUCK-PEZZEI; HUCK, 2018).

Este trabalho utiliza imagens hiperespectrais para fazer a determinação dos princípios ativos Ácido gálico, Catequina e Resveratrol, na canela. Os métodos de Mínimos Quadrados Parciais e Análise Discriminante (PLS-DA) são aplicados para fazer a determinação dos princípios ativos na canela através de imagens hiperespectrais.

A presente monografia está dividida em cinco Capítulos. O Capítulo 2 apresenta uma descrição sobre *Cinnamomum verum*, princípios ativos, imageamento hiperespectral, e quimiometria. O Capítulo 3 descreve os materiais e métodos que foram aplicados, incluindo a etapa de pré-processamento dos dados e o modelo empregado para a determinação dos princípios ativos. O Capítulo 4 apresenta os resultados obtidos a partir da aplicação do modelo e as discussões a respeito dos resultados. Por fim, o Capítulo 5 apresenta as considerações finais e sugestões de trabalhos futuros deste trabalho.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Cinnamomum verum, conhecida popularmente como canela verdadeira e frequentemente denominada por seu sinónimo taxonómico *Cinnamomum zeylanicum*, é uma espécie de pequenas árvores com aproximadamente 10 a 15m de altura pertencentes à família *Lauraceae*, nativa do Sri Lanka. A especiaria canela é extraída da casca interna de diversas espécies de árvores do género *Cinnamomum*. Diversos estudos realizados em animais revelaram que a canela possui ações hipoglicemia, digestiva, antiespasmódica, antisséptica, antifúngica, antioxidante, antialérgica, antitrombótica e antipirética (JAIN et al., 2015).

Além do uso na culinária, a canela tem sido aplicada em diversas culturas devido aos seus valores medicinais. Na literatura Chinesa foi registrado o uso da canela para propósitos medicinais a mais de 4000 anos. A canela é constituída por diversos compostos bioativos que contribuem diretamente para os efeitos medicinais da canela (WANG; HARRINGTON; CHEN, 2020). O interesse de pesquisa do perfil fitoquímico da canela aumentou substancialmente devido a evidência emergente dos seus efeitos farmacológicos benéficos. A canela possui altos níveis de óleos essenciais, sendo o cinamaldeído o principal composto que dá à canela seu odor e sabor característicos (GRUENWALD; FREDER; ARMBRUESTER, 2010). Outros compostos constituintes da canela são fenólicos, terpenóides, saponinas e fitoesteróis (BERNARD et al., 2014).

De acordo com pesquisadores malaios e pesquisadores do Departamento de Agricultura dos Estados Unidos (EUA), a canela é uma das especiarias mais importantes usadas diariamente por pessoas em todo o mundo (HARIRI; GHASVAND, 2016). Pesquisadores da Califórnia descobriram que os compostos cinamaldeído e epicatequina presentes na canela, inibem a acumulação de proteínas da família tau. A acumulação dessa proteína pode formar emaranhados neurofibrilares, que são uma característica da doença de Alzheimer (GEORGE; LEW; GRAVES, 2013).

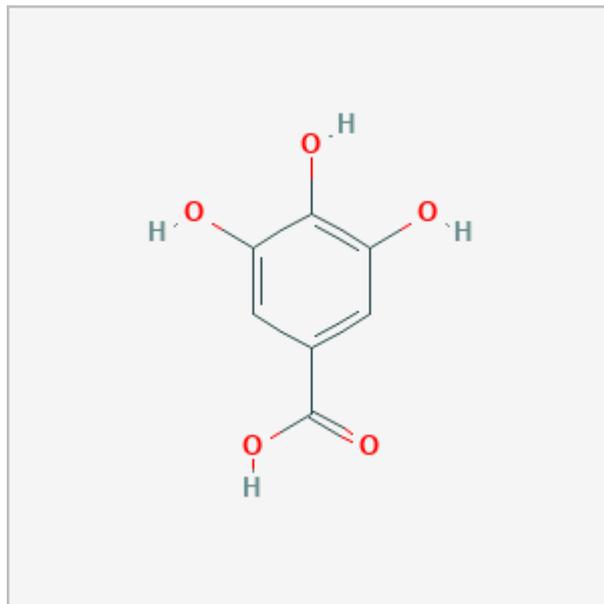
A canela é amplamente explorada quanto aos seus efeitos potenciadores da insulina. A suplementação de canela pode ser considerada como uma opção de suplemento dietético adicional para controlar a glicose no sangue e os níveis de pressão sanguínea em conjunto com medicamentos convencionais para tratar diabetes mellitus tipo 2 (AKILEN et al., 2010).

2.1 Princípios ativos

2.1.1 Ácido gálico

Ácido gálico (Figura 1) é um composto fenólico vegetal endógeno que é encontrado abundantemente em chás, frutas silvestres, vinho e em outros alimentos.

Figura 1 - Estrutura do Ácido gálico



Fonte: PubChem CID 370

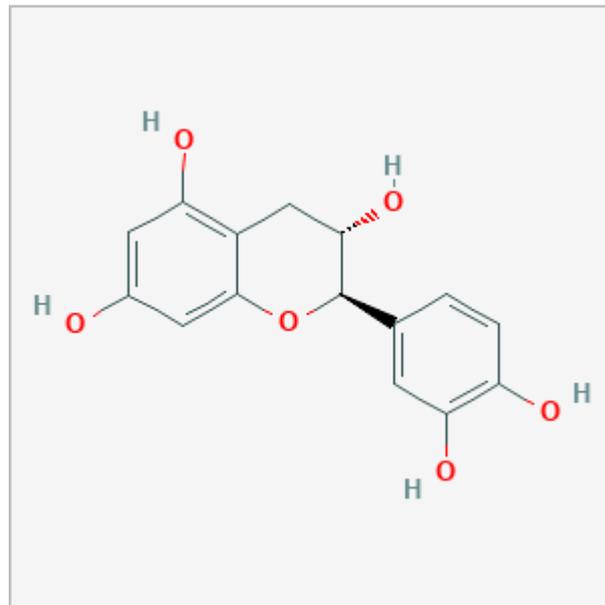
O ácido gálico age como um mecanismo de defesa natural em plantas contra infecções microbianas. Possui um grande potencial antioxidante e tem aplicações em diversas áreas terapêuticas e farmacêuticas (CHOUBEY et al., 2018). Pesquisas têm demonstrado que o ácido gálico possui diversos efeitos de proteção contra vários tipos tumores. Deste modo, o ácido gálico é um aditivo valioso com vitaminas e como forma de suplementação nutricional para prevenir os riscos de câncer (GOLUMBIC; MATTILL, 1942).

Aterosclerose coronária é uma doença crônica que pode levar ao infarto do miocárdio, uma das principais causas de morte e deficiência em todo o mundo (THYGESEN; ALPERT; WHITE, 2007). De acordo com Priscilla e Prince (2009) o ácido gálico pode proteger o miocárdio contra o estresse oxidativo provocado por isoproterenol e restaurar de volta as atividades das enzimas lisossomais próximas ao nível normal.

2.1.2 Catequina

Catequina (Figura 2) é um fitonutriente pertencente à família dos polifenóis, e tem uma forte ação antioxidante. É encontrada de forma natural em alguns alimentos. É composta por epicatequinas, epicatequinas galato, epigallocatequina e epigallocatequina galato.

Figura 2 - Estrutura da Catequina



Fonte: PubChem CID 9064

Segundo Valko et al (2007) as catequinas possuem indicativos de serem capazes de gerar e eliminar os radicais livres e mostrar seus efeitos benéficos devido a uma combinação de ambos os mecanismos.

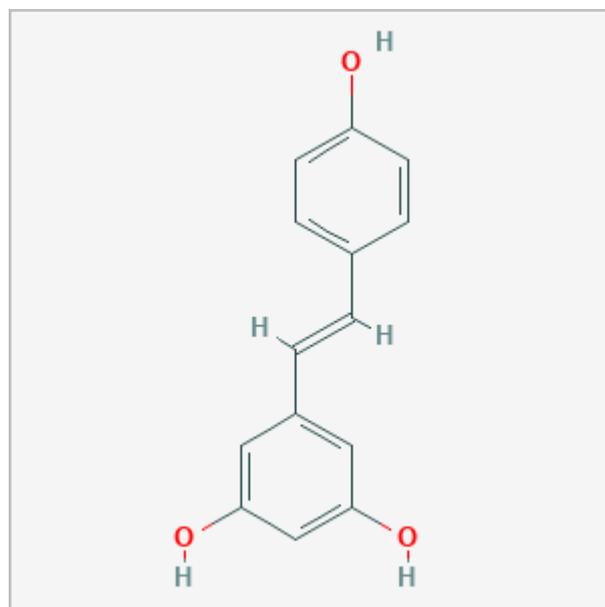
Ao longo dos últimos anos as catequinas têm atraído interesse devido aos seus diversos efeitos benéficos, como anti-hipertensiva, antibacteriana, anti-inflamatória, antioxidante e proteção contra aterosclerose. Há também um número crescente de estudos que demonstram que as catequinas podem possuir atividade anticancerígena em diversos órgãos, como esôfago, estômago, intestino delgado, cólon, pulmão, pâncreas e entre outros (FAN et al., 2017).

Catequinas têm sido relatadas como potenciais agentes anti-influenza em vários estudos experimentais. As catequinas impedem a interação do vírus com a membrana celular quando este invade a célula. O potencial das catequinas contra infecções de vírus da influenza foi documentado desde o final da década de 1990 (FURUSHIMA; IDE; YAMADA, 2018).

2.1.3 Resveratrol

Resveratrol (Figura 3) é um polifenol que é ricamente encontrado em uvas, vinho, amendoim e frutas vermelhas. O resveratrol tem atraído a atenção de cientistas e médicos devido aos seus efeitos benéficos à saúde. O resveratrol possui propriedades antioxidantes, tem efeitos antienvhecimento e anticâncer. (BREUSS; ATANASOV; UHRIN, 2019)

Figura 3 - Estrutura do Resveratrol



Fonte: PubChem CID 445154

Os efeitos anticâncer do resveratrol têm sido estudados extensivamente, nos últimos anos diversos artigos de pesquisa e revisões têm surgido como foco nessa área. Estas pesquisas recentes destacam o uso deste importante polifenol natural como agente quimiopreventivo e anticâncer (RAUF et al., 2017).

Pesquisas demonstram que o resveratrol possui efeitos benéficos no tratamento de doenças cardiovasculares. Estudos já realizados mostraram os efeitos positivos do resveratrol contra a insuficiência cardíaca e arritmias ventriculares (BACZKÓ; LIGHT, 2015).

2.2 Imageamento hiperespectral

O Imageamento hiperespectral (*HyperSpectral Imaging*, HSI) é uma técnica emergente baseada em espectroscopia que analisa uma ampla faixa do espectro eletromagnético além da

faixa do visível (KULKA R; LEWIS DM; ZUFELT IE, 1972). Em HSI, a aquisição de cada imagem é feita em uma específica faixa do espectro eletromagnético. Os pixels de uma imagem hiperespectral contém informações espectrais que são adicionadas como uma terceira dimensão de valores na imagem, resultando em um cubo de dados tridimensionais (LEE; YOUNAN; KING, 2002).

O HSI é um método promissor que tem sido aplicado em diversas áreas de trabalho. As aplicações iniciais em HSI eram voltadas para o sensoriamento remoto em regiões terrestres. Recentemente, com a descoberta do potencial do HSI em outras áreas, a técnica tem sido aplicada no controle de qualidade de alimentos, no setor médico para o diagnóstico de doenças, tais como câncer e doenças vasculares periféricas, no reconhecimento facial em biomedicina, e oftalmologia e oncologia (DALE et al., 2013).

No setor farmacêutico a técnica HSI juntamente com métodos de análise multivariada vem sendo aplicada na determinação da composição de uma ampla diversidade de materiais. É uma técnica que tem chamado atenção pelo fato do seu potencial não destrutivo e da grande quantidade de informações que são obtidas através de uma única imagem hiperespectral. Isso ocorre devido à característica de que cada pixel em uma imagem hiperespectral ser formado por um espectro inteiro. Tal característica é muito eficaz para visualização da distribuição e da composição de diversos compostos químicos em uma amostra (OBISESAN et al., 2020).

2.3 Quimiometria

Quimiometria é uma disciplina química que consiste na aplicação de métodos matemáticos e estatísticos em dados de origem química. O termo “Quimiometria” foi estabelecido no início da década de 1970 por Svante Wold, Bruce L. Kowalski, and D.L. Massart. A quimiometria engloba um conjunto de métodos incluindo estatística básica, processamento de sinal, projeto fatorial, calibração, ajuste de curva, análise fatorial, detecção de reconhecimento de padrão e rede neural (SARKER; NAHAR, 2015).

Os métodos utilizados em quimiometria vêm sendo aplicados em imagens hiperespectrais devido à sua capacidade de redução de dimensionalidade dos dados, retenção de informações espectrais importantes, e classificação ou quantificação de áreas importantes em uma amostra. Dentre alguns métodos utilizados na quimiometria estão Análise de Componentes Principais (*Principal Components Analysis*, PCA), K-médias, Análise Discriminante Linear (*Linear Discriminant Analysis*, LDA), Mínimos Quadrados Parciais e

Análise Discriminante (*Partial Least Squares-Discriminant Analysis*, PLS-DA) e Redes Neurais Artificiais (*Artificial Neural Networks*, ANN) (AMIGO; MARTÍ; GOWEN, 2013).

A quimiometria é normalmente aplicada à área de sinais, mas recentemente, a quimiometria e o Imageamento hiperespectral estão sendo utilizados em conjunto em diversos trabalhos recentes devido ao potencial obtido pela combinação destes métodos. Desse modo, a quimiometria vem evoluindo de uma abordagem inicialmente voltada para sinais, para uma nova abordagem utilizando imagens.

2.3.1 Análise de Componentes Principais

Análise de Componentes Principais (*Principal Components Analysis*, PCA) é uma técnica de análise multivariada utilizada para redução de dimensionalidade de grandes conjuntos de dados de difícil interpretação, a redução é realizada com objetivo de aumentar a interpretabilidade dos dados, mas ao mesmo tempo, minimizando a perda de informações (JOLLIFE; CADIMA, 2016).

A PCA realiza esse processo através do cálculo de novas variáveis denominadas Componentes Principais, estas variáveis são obtidas através de combinações lineares das variáveis originais. O número de componentes principais determinado passa a ser o número de variáveis consideradas na análise. As primeiras componentes principais são as mais importantes pois explicam a maior parte de variação total dos dados originais (ABDI; WILLIAMS, 2010).

2.3.2 Mínimos Quadrados Parciais e Análise Discriminante

Mínimos quadrados parciais (*Partial Least Square Regression*, PLSR) é um método de regressão multivariada de variável latente com base na covariância entre os preditores X e a resposta y . O método PLSR busca encontrar uma direção multidimensional no espaço X que possa explicar a variação multidimensional máxima no y (GÓRSKI; KOWALCZE; JAKUBOWSKA, 2019). O método PLSR é formado pelas fórmulas (1) e (2):

$$X = TP^T + E \quad (1)$$

$$y = UQ^T + F \quad (2)$$

onde X é uma matriz $n \times m$ de preditores, y é uma matriz $n \times p$ matriz de respostas, T e U são matrizes $n \times p$ das projeções de X e y (denominada também de matrizes de *scores*), respectivamente, P e Q são matrizes $m \times l$ e $p \times l$ ortogonais de *loadings*, respectivamente, e E e F são matrizes de erro.

No PLSR, as variáveis originais são substituídas por variáveis latentes ou fatores que são obtidos através de combinações lineares entre as variáveis dependentes e independentes. O PLSR surgiu para eliminar o problema de multicolinearidade na estimação dos coeficientes de regressão. O problema de multicolinearidade ocorre quando existe muitas variáveis explicativas X com uma extrema relação entre elas. A presença desse problema no modelo pode resultar em coeficientes de regressão insignificantes para a variável explicada, logo, isso pode causar dificuldades na interpretação da equação de regressão (MATEOS-APARICIO, 2011).

Para criar um modelo de classificação o PLSR é combinado com o método de análise discriminante (*Discriminant Analysis*, DA), e resulta no PLS-DA. No PLS-DA a variável resposta y é formada de valores binários 0 ou 1 para expressar uma associação de classe (PEERBHAY; MUTANGA; ISMAIL, 2013).

3 MATERIAIS E MÉTODOS

3.1 Princípios ativos (padrões) e amostras de canela

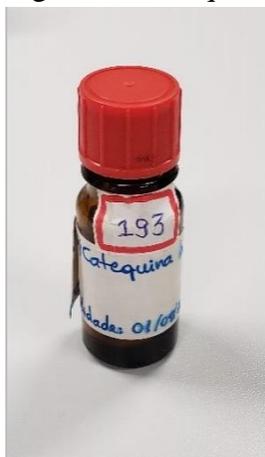
Os padrões e as amostras de canela utilizados neste trabalho foram fornecidos pelo Laboratório de Análise Farmacêutica e Ambiental (LAFAM) da Universidade Federal de Goiás (UFG). Ao todo foram 3 princípios ativos (Ácido gálico, Catequina e Resveratrol) (Figura 4,5 e 6) e 17 amostras (Figura 7) de canelas obtidas de diferentes marcas e regiões (Quadro 1).

Figura 4 - Ácido gálico



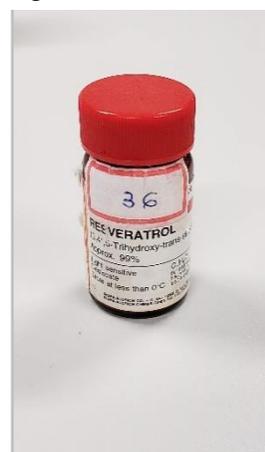
Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 5 - Catequina



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 6 - Resveratrol



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 7 - Amostras de canela



Fonte: Elaborado pelo autor

Quadro 1 - Marcas e origens das amostras de canela

Amostra	Marca	Local
1	Denner	Indonésia
2	Fairway	Estados Unidos
3	Não identificado	Goiânia – GO
4	Kitano	Paraná / Minas Gerais
5	Velly	Aparecida de Goiânia - GO
6	Mais Sabor	Goiânia – GO
7	Tempero Baiano	Paraná
8	Paladar	Goiânia – GO
9	MF Ervas medicinais e especiarias	Trindade – GO
10	Qualitá	São Paulo
11	Kayia	Grécia
12	Di Cheff	Aparecida de Goiânia – GO
13	Escazu	Costa Rica
14	Pastéis de Belém	Portugal
15	Premium	Inhumas – GO
16	Junco	Uberlândia – MG
17	MG Canyella molta	Espanha

Fonte: Elaborado pelo autor

A aquisição das imagens hiperespectrais dos padrões e amostras de canela foi realizada no Laboratório de Computação Científica (LCC) da Pontifícia Universidade Católica de Goiás (PUC-GO). A câmera hiperespectral SisuCHEMA do LCC foi utilizada para produzir as imagens hiperespectrais dos padrões e amostras de canela utilizando a faixa espectral do infravermelho próximo (*Near Infrared*, NIR).

3.2 Pré-processamento dos dados

Antes da etapa de classificação, os padrões e as amostras de canela foram submetidos a uma etapa de pré-processamento para se adequar a entrada do modelo de classificação. As imagens hiperespectrais dos dados são lidas na forma de um hipercubo de dados de dimensão ($M \times N \times \lambda$), onde M e N representam informações espaciais, e λ representa os comprimentos

de onda. Para ser possível aplicar a etapa de pré-processamento aos dados os hipercubos foram transformados em uma matriz de dimensão $(M \times N \times \lambda)$, onde as linhas correspondem aos pixels/espectros e as colunas aos comprimentos de onda/variáveis.

No pré-processamento, a primeira técnica empregada foi a remoção de fundo utilizando o método não supervisionado K-médias para extrair somente a região de interesse a ser analisada.

Após a remoção de fundo, foi aplicado um filtro de mediana de janela de tamanho 3 a cada espectro para a remoção de *outliers* presentes nos dados.

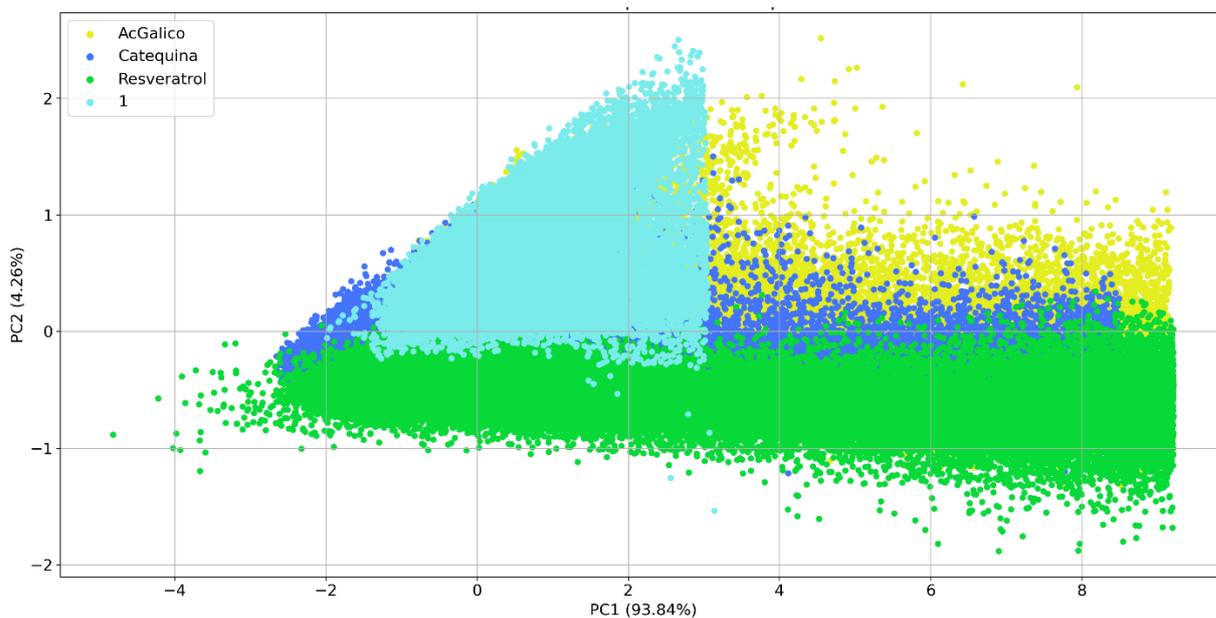
Para suavização e remoção de ruídos presentes nos dados, foi aplicado o filtro Savitzky-Golay a cada espectro com os seguintes parâmetros: janela de 21 pontos, polinômio de segundo grau e derivada de primeira ordem.

Por último, o filtro de padronização (*Standard normal variate*, SNV) foi aplicado a cada espectro. O SNV consiste em subtrair cada espectro pela sua média e dividi-lo pelo seu próprio desvio padrão. Ao final, cada espectro terá média 0 e desvio padrão igual 1.

3.3 Análise de Componentes Principais

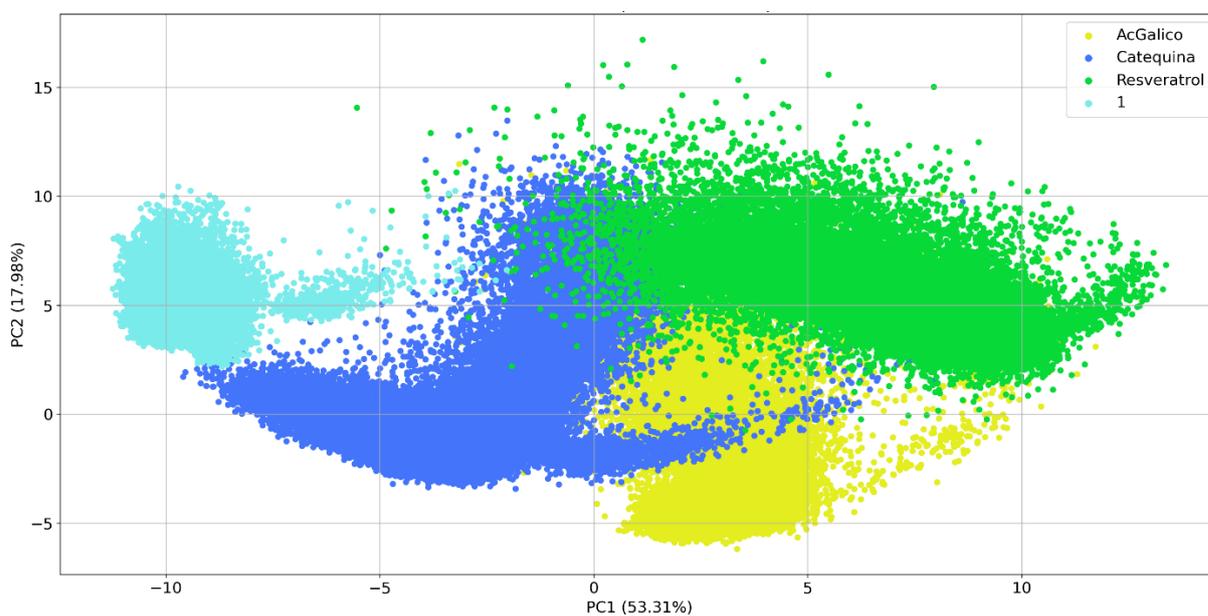
A análise de componentes principais foi utilizada para análise exploratória dos dados. A Figura 8 apresenta os três padrões (Ácido gálico, Catequina e Resveratrol) e a amostra de canela 1 sem as etapas de pré-processamento. A Figura 9 apresenta o resultado da aplicação dos métodos de pré-processamento aos dados. Nota-se que após a fase de pré-processamento dos dados, a visualização de agrupamentos de dados pertencentes a um mesmo grupo fica mais evidente, permitindo um melhor desempenho do modelo PLS-DA na determinação dos princípios ativos nas amostras de canela.

Figura 8 – Dados sem pré-processamento



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 9 - Dados pré-processados



Fonte: Elaborado pelo autor

3.4 Mínimos Quadrados Parciais e Análise Discriminante

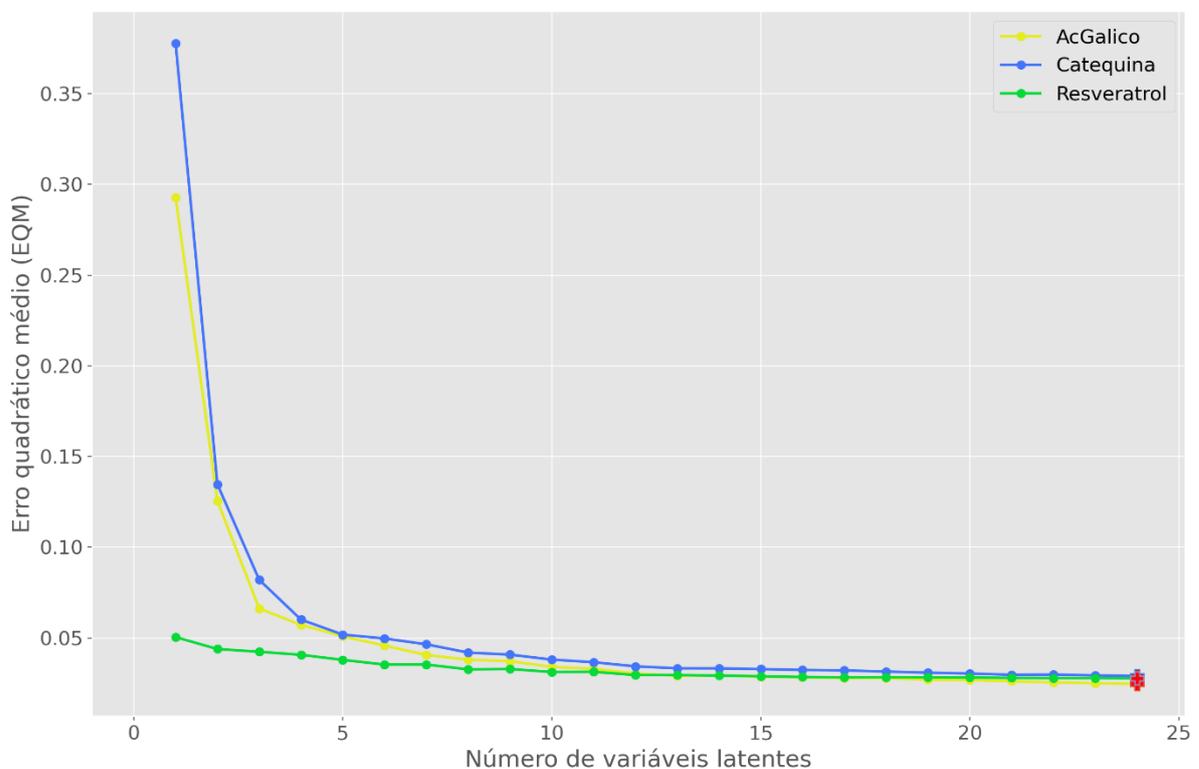
Na construção do modelo de classificação PLS-DA os padrões foram utilizados para como dados de treinamento para o modelo, e as amostras de canela como dados de teste para a

classificação dos padrões. Foram criados 3 modelos PLS-DA para os padrões Ácido gálico, Catequina e Resveratrol.

Na fase de treinamento, o primeiro passo foi determinar o número ótimo de variáveis latentes para cada modelo, para isso o método PLSR foi executado e testado com validação cruzada para determinar o número de variáveis latente com o menor Erro Quadrático Médio (EQM) conforme a Figura 10.

Em seguida, cada modelo foi treinado com o número ótimo de variáveis latente determinado. Após a fase de treinamento, os modelos foram aplicados a todas as amostras de canela, exceto a amostra 11 pois foi corrompida no processo de produção das imagens hiperespectrais. Para determinar a qualidade dos modelos usados, o coeficiente de determinação (R^2) foi calculado para cada modelo utilizando-se validação cruzada. Os seguintes coeficientes de determinação 0.96, 0.97 e 0.96, foram obtidos para os modelos PLS-DA de Ácido gálico, Catequina e Resveratrol, respectivamente. Os modelos PLS-DA para os princípios ativos Ácido gálico, Catequina e Resveratrol, obtiveram as seguintes acurácias de 95.40%, 90.79% e 86.72%, respectivamente.

Figura 10 - Número ótimo de variáveis latentes

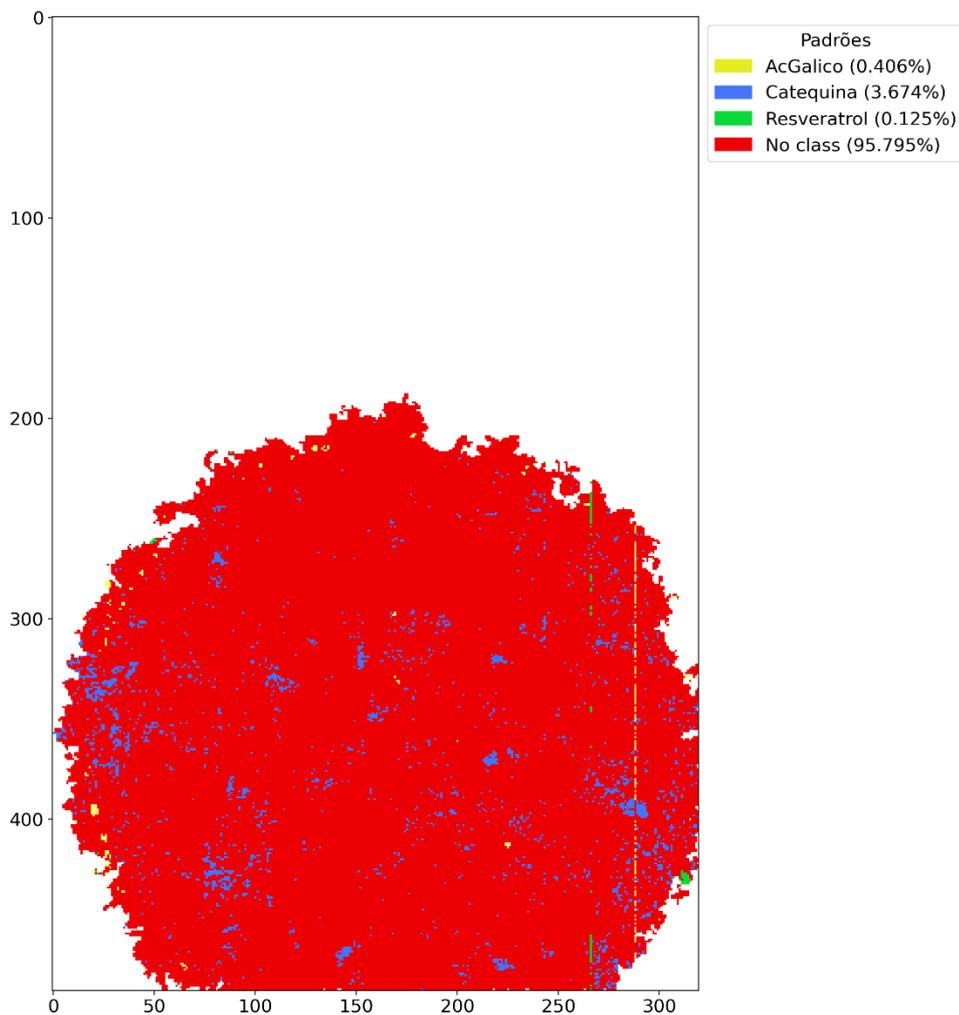


Fonte: Elaborado pelo autor

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os três modelos PLS-DA foram aplicados às 16 amostras de canela para a determinação da concentração dos princípios ativos em termos da quantidade de pixels classificados como determinado padrão. A Figura 11 apresenta o resultado da aplicação dos modelos PLS-DA à amostra 15, sendo a amostra de canela com o maior percentual de princípios ativos classificados, nota-se que apesar das técnicas de pré-processamento aplicadas, os modelos PLS-DA de Ácido gálico e Resveratrol classificou algum tipo de ruído como princípio ativo. A Tabela 1 apresenta a concentração dos padrões (Ácido gálico, Catequina e Resveratrol) em todas as amostras de canela. De acordo com resultados apresentados na Tabela 1, em geral, os princípios ativos Ácido gálico e Catequina são predominantes em termos de quantidade percentual em relação ao Resveratrol.

Figura 11 - Amostra de canela 15



Fonte: Elaborado pelo autor

Tabela 1 - Concentração dos princípios ativos nas amostras de canela

Amostras	Ácido gálico	Catequina	Resveratrol	No class	Total
1	28 (0.042%)	31 (0.046%)	13 (0.019%)	66226 (99.891%)	66298 (100%)
2	105 (0.153%)	5 (0.007%)	96 (0.139%)	68401 (99.699%)	68607 (100%)
3	375 (0.489%)	147 (0.191%)	118 (0.153%)	76046 (99.165%)	76686 (100%)
4	4 (0.006%)	27 (0.041%)	1 (0.001%)	65645 (99.951%)	65677 (100%)
5	181 (0.261%)	178 (0.257%)	150 (0.216%)	68727 (99.264%)	69236 (100%)
6	771 (1.090%)	26 (0.036%)	339 (0.479%)	69566 (98.393%)	70702 (100%)
7	532 (0.676%)	40 (0.050%)	316 (0.402%)	77718 (98.870%)	78606 (100%)
8	202 (0.291%)	20 (0.028%)	154 (0.222%)	68860 (99.456%)	69236 (100%)
9	257 (0.383%)	46 (0.068%)	7 (0.010%)	66683 (99.537%)	66993 (100%)
10	108 (0.154%)	31 (0.044%)	786 (1.126%)	68867 (98.674%)	69792 (100%)
12	159 (0.227%)	1556 (2.230%)	139 (0.199%)	67905 (97.342%)	69759 (100%)
13	747 (0.943%)	309 (0.390%)	191 (0.241%)	77932 (98.425%)	79179 (100%)
14	313 (0.436%)	306 (0.427%)	333 (0.464%)	70700 (98.671%)	71652 (100%)
15	303 (0.406%)	2739 (3.673%)	93 (0.124%)	71421 (95.795%)	74556 (100%)
16	966 (1.419%)	9 (0.013%)	269 (0.395%)	66821 (98.172%)	68065 (100%)
17	482 (0.643%)	61 (0.081%)	202 (0.269%)	74129 (99.004%)	74874 (100%)

Fonte: Elaborado pelo autor

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os resultados obtidos através da aplicação dos modelos PLS-DA demonstram um indicativo da presença dos princípios ativos (Ácido gálico, Catequina e Resveratrol) como constituintes da canela. Ainda, é notável a presença majoritária do Ácido gálico e da Catequina nas amostras de canela.

Como apresentado neste trabalho, os princípios ativos analisados possuem um grande potencial positivo biológico para a tratamento de diversas doenças. Os resultados obtidos neste trabalho revelam um possível potencial na pesquisa destes princípios ativos na canela para o desenvolvimento de novos medicamentos.

Neste trabalho foi considerado somente a análise dos princípios ativos Ácido gálico, Catequina e Resveratrol, nas amostras de canela. No entanto, a canela é constituída de outros compostos, tais como Cinamaldeído e Eugenol, que também podem ser analisados pois possuem um grande potencial benéfico medicinal.

Como trabalhos futuros, pode-se tentar realizar a identificação de outros princípios ativos na canela. Além disso, é importante também analisar quais comprimentos de onda do espectro eletromagnético mais influenciam na identificação de cada princípio ativo.

REFERÊNCIAS

- ABDI, H.; WILLIAMS, L. J. Principal component analysis. **Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics**, v. 2, n. 4, p. 433–459, 2010.
- AKILEN, R. et al. Glycated haemoglobin and blood pressure-lowering effect of cinnamon in multi-ethnic Type 2 diabetic patients in the UK: A randomized, placebo-controlled, double-blind clinical trial. **Diabetic Medicine**, v. 27, n. 10, p. 1159–1167, 2010.
- AMIGO, J. M.; MARTÍ, I.; GOWEN, A. Hyperspectral Imaging and Chemometrics. A Perfect Combination for the Analysis of Food Structure, Composition and Quality. **Data Handling in Science and Technology**, v. 28, p. 343–370, 2013.
- BACZKÓ, I.; LIGHT, P. E. Resveratrol and derivatives for the treatment of atrial fibrillation. **Annals of the New York Academy of Sciences**, v. 1348, n. 1, p. 68–74, 2015.
- BERNARD, D. et al. The Effect of Different Drying Methods on the Phytochemicals and Radical Scavenging Activity of Ceylon Cinnamon (*Cinnamomum zeylanicum*) Plant Parts. **European Journal of Medicinal Plants**, v. 4, n. 11, p. 1324–1335, 2014.
- BREUSS, J. M.; ATANASOV, A. G.; UHRIN, P. Resveratrol and its effects on the vascular system. **International Journal of Molecular Sciences**, v. 20, n. 7, p. 1–18, 2019.
- CHOUBEY, S. et al. Probing Gallic Acid for Its Broad Spectrum Applications. **Mini-Reviews in Medicinal Chemistry**, v. 18, n. 15, p. 1283–1293, 2018.
- DALE, L. M. et al. Hyperspectral imaging applications in agriculture and agro-food product quality and safety control: A review. **Applied Spectroscopy Reviews**, v. 48, n. 2, p. 142–159, 2013.
- FAN, F. Y. et al. Catechins and their therapeutic benefits to inflammatory bowel disease. **Molecules**, v. 22, n. 3, 2017.
- FURUSHIMA, D.; IDE, K.; YAMADA, H. Effect of tea catechins on influenza infection and the common cold with a focus on epidemiological/clinical studies. **Molecules**, v. 23, n. 7, p. 1–8, 2018.
- GEORGE, R. C.; LEW, J.; GRAVES, D. J. Interaction of cinnamaldehyde and epicatechin with tau: Implications of beneficial effects in modulating alzheimer's disease pathogenesis. **Journal of Alzheimer's Disease**, v. 36, n. 1, p. 21–40, 2013.
- GOLUMBIC, C.; MATTILL, H. A. The antioxidant properties of gallic acid and allied compounds. **Oil and Soap**, v. 19, n. 8, p. 144–145, 1942.
- GÓRSKI, Ł.; KOWALCZE, M.; JAKUBOWSKA, M. Classification of six herbal bioactive compositions employing LAPV and PLS-DA. **Journal of Chemometrics**, v. 33, n. 4, p. 1–15, 2019.
- GRUENWALD, J.; FREDER, J.; ARMBRUESTER, N. Cinnamon and health. **Critical Reviews in Food Science and Nutrition**, v. 50, n. 9, p. 822–834, 2010.

HARIRI, M.; GHIASVAND, R. Drug Discovery from Mother Nature. **Advances in experimental medicine and biology**, v. 929, n. September, p. 1–2, 2016.

JAIN, S. et al. Effect of Cinnamomum zeylanicum extract on scopolamine-induced cognitive impairment and oxidative stress in rats. **Nutritional Neuroscience**, v. 18, n. 5, p. 210–216, 2015.

JOLLIFE, I. T.; CADIMA, J. Principal component analysis: A review and recent developments. **Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v. 374, n. 2065, 2016.

KULKA R; LEWIS DM; ZUFELT IE. Diagnostic procedures. **IBM Tech Disclosure Bull**, v. 14, n. 9, p. 2749–2750, 1972.

LEE, H. S.; YOUNAN, N. H.; KING, R. L. Hyperspectral image cube compression combining JPEG-2000 and spectral decorrelation. **International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS)**, v. 6, n. C, p. 3317–3319, 2002.

MATEOS-APARICIO, G. Partial least squares (PLS) methods: Origins, evolution, and application to social sciences. **Communications in Statistics - Theory and Methods**, v. 40, n. 13, p. 2305–2317, 2011.

NABAVI, S. F. et al. Antibacterial effects of cinnamon: From farm to food, cosmetic and pharmaceutical industries. **Nutrients**, v. 7, n. 9, p. 7729–7748, 2015.

OBISESAN, K. A. et al. Determination and quantification of the distribution of cn-nl nanoparticles encapsulating glycyrrhetic acid on novel textile surfaces with hyperspectral imaging. **Journal of Functional Biomaterials**, v. 11, n. 2, 2020.

PEERBHAY, K. Y.; MUTANGA, O.; ISMAIL, R. Commercial tree species discrimination using airborne AISA Eagle hyperspectral imagery and partial least squares discriminant analysis (PLS-DA) in KwaZulu-Natal, South Africa. **ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing**, v. 79, p. 19–28, 2013.

PITCHAI, D. et al. Database on pharmacophore analysis of active principles, from medicinal plants. **Bioinformatics**, v. 5, n. 2, p. 43–45, 2010.

RAUF, A. et al. A comprehensive review of the health perspectives of resveratrol. **Food and Function**, v. 8, n. 12, p. 4284–4305, 2017.

SARKER, S. D.; NAHAR, L. **Applications of High Performance Liquid Chromatography in the Analysis of Herbal Products**. [s.l.] Elsevier Inc., 2015.

THYGESEN, K.; ALPERT, J. S.; WHITE, H. D. Universal Definition of Myocardial Infarction. **Journal of the American College of Cardiology**, v. 50, n. 22, p. 2173–2195, 2007.

TÜRKER-KAYA, S.; HUCK-PEZZEI, V. A.; HUCK, C. W. Infrared spectroscopic imaging studies of medicinal plants. **NIR news**, p. 9–14, 2018.

WANG, Y.; HARRINGTON, P. DE B.; CHEN, P. Metabolomic profiling and comparison of major cinnamon species using UHPLC–HRMS. **Analytical and Bioanalytical Chemistry**, v. 412, n. 27, p. 7669–7681, 2020.