

**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA - UNESP  
CÂMPUS DE JABOTICABAL**

**ABORDAGEM MULTIVARIADA, PERFIL COMPOSICIONAL  
E CONSTRUÇÃO DE CURVA DE CALIBRAÇÃO PARA  
PREDIÇÃO DO TEOR DE ÓLEO EM *Jatropha curcas* L.**

**Aretha Arcenio Pimentel Corrêa  
Tecnóloga em Biocombustíveis**

**2014**

**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA - UNESP  
CÂMPUS DE JABOTICABAL**

**ABORDAGEM MULTIVARIADA, PERFIL COMPOSICIONAL  
E CONSTRUÇÃO DE CURVA DE CALIBRAÇÃO PARA  
PREDIÇÃO DO TEOR DE ÓLEO EM *Jatropha curcas* L.**

**Aretha Arcenio Pimentel Corrêa**

**Orientadora: Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Sandra Helena Unêda-Trevisoli**

**Coorientadores: Prof. Dr. Antonio Orlando Di Mauro**

**Prof. Dr. Danilo Luiz Flumignan**

**Dissertação apresentada à Faculdade de  
Ciências Agrárias e Veterinárias – Unesp,  
Câmpus de Jaboticabal, como parte das  
exigências para a obtenção do título de Mestre  
em Agronomia (Genética e Melhoramento de  
Plantas)**

**2014**

Corrêa, Aretha Arcenio Pimentel  
C824a Abordagem multivariada, perfil composicional e construção de  
curva de calibração para predição do teor de óleo em *Jatropha curcas*  
L. / Aretha Arcenio Pimentel Corrêa. -- Jaboticabal, 2014  
xi, 45 f. : il. ; 28 cm

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista,  
Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias, 2014  
Orientadora: Sandra Helena Unêda-Trevisoli  
Coorientadores: Antônio Orlando Di Mauro, Danilo Luiz Flumignan  
Banca examinadora: Luciana Maria Saran, Everton Luis Finotto  
Bibliografia

1. Pinhão-manso. 2. Espectroscopia no infravermelho próximo. 3.  
Cromatografia gasosa. 4. PCA. 5. Análise de agrupamento. I. Título. II.  
Jaboticabal-Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias.

CDU 582.682.1



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

CAMPUS DE JABOTICABAL

FACULDADE DE CIÊNCIAS AGRÁRIAS E VETERINÁRIAS DE JABOTICABAL

### CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

**TÍTULO:** ABORDAGEM MULTIVARIADA, PERFIL COMPOSICIONAL E CONSTRUÇÃO DE CURVA DE CALIBRAÇÃO PARA PREDIÇÃO DO TEOR DE ÓLEO EM *Jatropha curcas* L.

**AUTORA:** ARETHA ARCENIO PIMENTEL CORRÊA

**ORIENTADORA:** Profa. Dra. SANDRA HELENA UNÊDA TREVISOLI

**CO-ORIENTADOR:** Prof. Dr. ANTONIO ORLANDO DI MAURO

**CO-ORIENTADOR:** Prof. Dr. DANILO LUIZ FLUMIGNAN

Aprovada como parte das exigências para obtenção do Título de MESTRE EM AGRONOMIA (GENÉTICA E MELHORAMENTO DE PLANTAS) , pela Comissão Examinadora:

Profa. Dra. SANDRA HELENA UNÊDA TREVISOLI

Departamento de Produção Vegetal / Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias de Jaboticabal

Profa. Dra. LUCIANA MARIA SARAN

Departamento de Tecnologia / Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias de Jaboticabal

Prof. Dr. EVERTON LUIS FINOTO

Agência Paulista de Tecnologia dos Agronegócios / Pindorama/SP

Data da realização: 27 de fevereiro de 2014.

## **DADOS CURRICULARES DA AUTORA**

ARETHA ARCENIO PIMENTEL CORRÊA – nascida em 01 de dezembro de 1989 em Jaboticabal – SP – Brasil. Em Agosto de 2008, iniciou o curso de Tecnologia em Biocombustíveis na Faculdade de Tecnologia - FATEC, campus de Jaboticabal, concluindo-o em Fevereiro de 2012. Em março do mesmo ano, iniciou o curso de mestrado em Agronomia, com Área de Concentração em Genética e Melhoramento de Plantas, na Universidade Estadual Paulista “Julio de Mesquita Filho” - UNESP, campus de Jaboticabal. Durante o período de realização do curso de mestrado, foi bolsista do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq.

“O que sabemos é uma gota; o que ignoramos é um oceano”.

- Isaac Newton

## **AGRADECIMENTOS**

À professora Sandra Helena-Unêda Trevisoli, pela orientação, ensinamentos, apoio e confiança transmitidos a mim;

Ao professor Danilo Luiz Flumignan, pela coorientação e pela análise cromatográfica;

Ao professor Antônio Orlando Di Mauro, pela coorientação e suporte;

À Viviane Formice Vianna, pela ajuda indispensável nas análises estatísticas;

À Mariana Silva Rosa Pazeto, por continuar me auxiliando, mesmo de longe;

Ao técnico Geraldo, auxiliar de campo Rubens (Faro) e estagiários Glauconita Bello, Paulo Selestrino e Suélen Andrade pela colaboração na execução dos trabalhos de campo.

À Fabrícia Gasparini, pelo auxílio na construção de diversas curvas de calibração durante todo o mestrado;

À todo o pessoal do laboratório de Biotecnologia Aplicada ao Melhoramento Genético de Plantas: Mariana, Viviane, Nádia, Daniel, Fabiana, Eduardo, Otávia, José Arantes, Anderson, Bruno, Elise, Renata, Alysson e Andréa pela harmoniosa convivência.

Aos funcionários do Departamento de Produção Vegetal: Mauro e Tito, por sempre aparecerem com agrados, deixando a rotina mais leve, e às secretárias Mônica e Rosane, pela ajuda em diversos momentos.

Aos meus pais, Elba e Joel, pelo amor incondicional, paciência, educação e apoio e aos meus irmãos, Elber e Tássia, que me ensinaram a escrever as primeiras palavras;

À minha segunda família, moradoras da república, Milene e Laís, pela amizade, força e estímulo sempre.

Aos meus amigos Tseng e Regiane por me fazerem acreditar na minha capacidade;

Ao Guilherme, amigo e namorado, pela ajuda em diversas etapas do experimento, pelas noites e finais de semana ao meu lado no laboratório, pelo amor, paciência, parceria e companheirismo;

Aos professores pelo conhecimento transmitido;

À FCAV pela oportunidade;

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq, pela concessão da bolsa de mestrado.

E a todos que de alguma forma contribuíram para esta conquista.

**MUITO OBRIGADA!**



## SUMÁRIO

	Página
<b>RESUMO</b> .....	xi
<b>ABSTRACT</b> .....	xii
<b>CAPÍTULO 1 – CONSIDERAÇÕES GERAIS</b> .....	1
<b>1. INTRODUÇÃO</b> .....	1
<b>2. REVISÃO DE LITERATURA</b> .....	2
2.1. Pinhão-manso .....	2
2.1.1. Aspectos agronômicos .....	2
2.1.2. Aspectos tecnológicos e industriais .....	4
2.1.3. Biodiesel de pinhão-manso <i>versus</i> diesel de petróleo .....	5
2.1.4. Subprodutos .....	6
2.1.5. Vantagens da cultura .....	6
2.1.6. Melhoramento genético do pinhão-manso .....	7
2.2. Espectroscopia no Infravermelho próximo .....	8
2.3. Cromatografia gasosa .....	9
2.4. Análise multivariada .....	10
2.4.1. Análise de componentes principais .....	11
2.4.2. Análise de agrupamento .....	12
<b>3. REFERÊNCIAS</b> .....	13
<b>CAPÍTULO 2 – CONSTRUÇÃO DE CURVA DE CALIBRAÇÃO PARA TEOR DE ÓLEO POR NIR E PERFIL COMPOSICIONAL DO ÓLEO POR CROMATOGRAFIA GASOSA EM <i>Jatropha curcas</i> L.</b> .....	17
<b>RESUMO</b> .....	17
<b>1. INTRODUÇÃO</b> .....	18
<b>2. MATERIAL E MÉTODOS</b> .....	19
2.1. Construção da curva de calibração .....	19
2.2. Extração de óleo .....	21
2.3. Determinação do perfil composicional do óleo de pinhão-manso .....	22
<b>3. RESULTADOS E DISCUSSÃO</b> .....	23
3.1. Construção de curva de calibração .....	23
3.2. Análise cromatográfica .....	26
<b>4. CONCLUSÕES</b> .....	28
<b>5. REFERÊNCIAS</b> .....	29

<b>CAPÍTULO 3 – ABORDAGEM MULTIVARIADA NA SELEÇÃO DE ACESSOS PROMISSORES DE PINHÃO-MANSO PARA O MELHORAMENTO GENÉTICO</b> .....	32
<b>RESUMO</b> .....	32
<b>1. INTRODUÇÃO</b> .....	33
<b>2. MATERIAL E MÉTODOS</b> .....	34
2.1. Determinação dos caracteres agronômicos.....	34
2.2. Análises estatísticas dos dados.....	35
2.2.1. Cálculo dos componentes principais .....	35
2.2.2. Análise de agrupamento .....	37
<b>3. RESULTADOS E DISCUSSÃO</b> .....	37
3.1. Análise de componentes principais .....	37
3.2. Análise de agrupamento.....	41
<b>4. CONCLUSÕES</b> .....	42
<b>5. REFERÊNCIAS</b> .....	43
<b>CAPÍTULO 4 - CONSIDERAÇÕES FINAIS</b> .....	45

## ABORDAGEM MULTIVARIADA, PERFIL COMPOSICIONAL E CONSTRUÇÃO DE CURVA DE CALIBRAÇÃO PARA PREDIÇÃO DO TEOR DE ÓLEO EM *Jatropha curcas* L.

**RESUMO** – Objetivou-se com este trabalho construir uma curva de calibração para predição do teor de óleo de pinhão-manso, usando a espectroscopia no infravermelho próximo (NIR), bem como traçar o perfil composicional do óleo de pinhão-manso por cromatografia gasosa, além de utilizar técnicas multivariadas para seleção de acessos promissores para programas de melhoramento genético. Para construção da curva, foram utilizadas sementes de 142 plantas, oriundas de 56 acessos, que tiveram óleo extraído por método destrutivo de sementes, para obtenção dos valores de referência, que situaram-se entre 29,32 a 49,69% (m/m) de óleo. Os espectros foram coletados de sementes sem tegumento, intactas em equipamento de espectroscopia NIR. Cada espectro foi obtido com uma média de 64 scans com resolução de  $16\text{ cm}^{-1}$ . As regiões espectrais selecionadas para a curva de calibração foram de 8344 a  $7736\text{ cm}^{-1}$ , 6072 a  $4968\text{ cm}^{-1}$  e 4520 a  $3976\text{ cm}^{-1}$ . Para avaliar a precisão da curva foram calculados o coeficiente de correlação ( $R^2$ ) que foi de 71,26% e o erro padrão de calibração (RMSECV) que foi de 0,138 entre os dados obtidos pelo método de referência e pelo NIR. Os resultados obtidos indicam que o método de referência utilizado foi satisfatório, apresentando boa correlação com a informação espectral, tornando a curva construída confiável, necessitando, entretanto da adição de novos dados para incremento na sua robustez e amplitude. A cromatografia gasosa indicou que os ácidos graxos com maiores porcentagens foram: oléico (43,45%), linoléico (35,13%), palmítico (13,44%) e esteárico (6,30%), concluindo que o perfil composicional do pinhão-manso é predominantemente insaturado. Para a abordagem multivariada, foram obtidos dados dos seguintes caracteres: teor de óleo, diâmetro do caule, altura da planta, comprimento e largura de semente, sendo os mesmos submetidos a análise de componentes principais e análise de agrupamento pelo método hierárquico utilizando distância Euclidiana e ligação entre os grupos pelo método de Ward. Na análise de componentes principais, três componentes explicaram 74,1% da variância contida nas variáveis originais e ficaram caracterizados pelas variáveis de teor de óleo, diâmetro de caule e comprimento de sementes. Foi possível discriminar 12 acessos promissores para programas de melhoramento genético. O dendrograma obtido pela análise de agrupamento apresentou dez grupos, influenciados pelas variáveis analisadas, onde oito dos 12 acessos discriminados pela PCA encontraram-se agrupados em dois grupos, evidenciando certo grau de similaridade entre os mesmos.

**Palavras-chave:** pinhão-manso, espectroscopia no infravermelho próximo, cromatografia gasosa, PCA, análise de agrupamento.

**MULTIVARIATE APPROACH, COMPOSITIONAL PROFILE AND  
CONSTRUCTION OF CALIBRATION CURVE FOR PREDICTION OF OIL  
CONTENT IN *Jatropha curcas* L.**

**ABSTRACT** - The aim of this study was to establish a calibration curve for prediction of oil content by NIR and the compositional profile by gas chromatography, both of *Jatropha curcas*, such as analyze multivariate techniques for purposes of selection of promising accessions for breeding programs. For the development of calibration curve, were used seeds of 142 plants, originated of 56 accessions, which had oil extracted by destructive method of seed to obtain reference values, which ranged from 29.32 to 49.69% of oil. The spectra were collected from intact seed's kernels. Each spectrum was taken with an average of 64 scans with resolution of  $16\text{ cm}^{-1}$ . The regions established for the calibration were  $8344\text{-}7736\text{ cm}^{-1}$ ,  $6072\text{-}4968\text{ cm}^{-1}$  and  $4520\text{-}3976\text{ cm}^{-1}$ . To evaluate the accuracy of the curve, was calculated the correlation coefficient ( $R^2$ ) which was 71.26% and the standard error of calibration (RMSECV) which was 0.138 between the data obtained by the reference method and the NIR. The results indicate that the reference method was satisfactory, showing correlation with the spectral information, making the curve reliable, requiring however, the addition of new data to increase the robustness and extent. Gas chromatography showed that fatty acids with the highest percentages were: oleic (43.45%), linoleic (35.13%), palmitic (13.44%) and stearic (6.30%), concluding that the compositional profile of *Jatropha curcas* oil is predominantly unsaturated. For multivariate approach data were obtained from the traits: oil content, stem diameter, plant height, length and width of seed. The data were submitted to principal component analysis and cluster analysis by the hierarchical method using Euclidean distance and connection between groups by Ward method. In principal components analysis, three components explained 74.1% of the variance contained in the original variables and were characterized by the variable oil content, stem diameter and length of seed. It was possible to discriminate 12 promising accessions for use in breeding programs. The dendrogram obtained by cluster analysis presented ten groups, influenced by variables, in which eight of 12 accessions discriminated by PCA found themselves grouped into two groups, with some degree of similarity between them.

**Keywords:** physic nut, near infrared spectroscopy, gas chromatographic, PCA, cluster analysis.

## CAPÍTULO 1 – CONSIDERAÇÕES GERAIS

### 1. INTRODUÇÃO

Atualmente, o mundo está passando por uma grande transação energética, decorrente das preocupações relacionadas à dependência da utilização de fontes de energia não-renováveis e aos impactos ambientais negativos gerados por esta prática. Na busca mundial por alternativas, diversos estudos, com diferentes culturas oleaginosas vêm sendo conduzidos. Uma dessas culturas é o pinhão-manso (*Jatropha curcas* L.). Trata-se de uma planta tropical, da família Euphorbiaceae, que tem se destacado entre as oleaginosas por ser uma planta rústica, perene e adaptável a uma série de ambientes, sendo bastante tolerante à seca e pouco atacada por pragas e doenças, entre outros atributos (SATURNINO et al., 2005). Suas sementes têm teor de óleo de aproximadamente 34% (TEIXEIRA, 1987), superior a outras oleaginosas como soja e algodão.

Fazendo-se um levantamento da pesquisa para pinhão-manso, em termos nacionais e mundiais, nota-se que não existem estatísticas com dados de produção, produtividade, teor de óleo etc. Percebe-se que há muito a se fazer em termos de pesquisa, desenvolvimento e inovação tecnológica, e que há necessidade urgente de investimentos (PAZETO, 2013).

Como não existem cultivares definidas, tem-se a necessidade urgente de se escolher e caracterizar acessos promissores de pinhão-manso para que se possa iniciar um programa de melhoramento genético (PAZETO, 2013).

No processo de caracterização de acessos, devem ser avaliados diversos atributos agronômicos, bem como caracteres de interesse, como o teor e a composição do óleo. Em programas de melhoramento genético, é imprescindível que tais análises sejam realizadas sem que haja destruição das sementes. Uma técnica que está sendo utilizada para este fim é a espectroscopia na região do infravermelho próximo (NIR).

Quando os genótipos são caracterizados, é possível realizar a seleção de acessos promissores, com auxílio de técnicas de análises multivariadas, iniciando assim, um programa de melhoramento genético da espécie.

Diante do exposto, os objetivos com o presente trabalho consistiram em construir uma curva de calibração para predição do teor de óleo de pinhão-manso por espectroscopia no infravermelho próximo (NIR), determinar o perfil composicional do óleo e selecionar acessos promissores de pinhão-manso por meio de análises multivariadas.

## **2. REVISÃO DE LITERATURA**

### **2.1. Pinhão-manso**

#### **2.1.1. Aspectos agronômicos**

A espécie *Jatropha curcas* L. (pinhão-manso) possui uma possível origem no Brasil, tendo sido introduzida por navegadores portugueses nas Ilhas do arquipélago Cabo Verde e Guiné, de onde foi disseminada pelo continente Africano (ARRUDA et al., 2004) e atualmente está distribuída em todas as regiões tropicais do globo. Segundo Cortesão (1956) e Peixoto (1973), sua distribuição geográfica é bastante vasta devido à sua rusticidade e resistência a longas estiagens e pragas, se adaptando a uma série de condições edafo-climáticas variáveis, desde o Nordeste até São Paulo e desde o Paraná até o norte do país.

O pinhão-manso é uma subárvore, que alcança de dois a cinco metros de altura, possui frutos com três sementes de 2 cm, por 11 mm de largura e 9 mm de espessura, oblongas e pretas. Suas folhas jovens são avermelhadas, se tornando verdes com o tempo, têm de três a cinco lóbulos, pecioladas, alternas, com nervuras esbranquiçadas e salientes na face inferior da lâmina foliar, sendo que suas flores são monóicas, pequenas e amarelo-esverdeadas. Seu plantio pode ser feito por mudas, sementes ou estacas. É uma cultura perene e suas árvores duram

aproximadamente 35 anos. Cada planta produz até vários quilogramas de sementes em um ano (DRUMMOND et al., 1984).

De acordo com Cortesão (1956) e Brasil (1985), citados em Pinhão Manso (2014) seu tronco tem diâmetro de cerca de 20 cm, possui raízes rasas e pouco ramificadas, caule liso, de lenho mole e medula desenvolvida, porém pouco resistente. Qualquer ferimento faz correr o látex em abundância que circula em seu floema. O tronco é ramificado desde a base, possui numerosas cicatrizes devido à queda das folhas na estação seca, as quais ressurgem logo após as primeiras chuvas.

Apesar de ser adaptado à regiões secas e possuir caule que armazena bastante água, nos períodos de seca apenas sobrevive, diminuindo sua produção de sementes (DRUMMOND et al., 1984).

É uma planta tipicamente tropical, preferindo regiões quentes, apesar de ter suportado bem o frio em alguns casos. De acordo com Tominaga et al. (2007), para uma boa produção, o ideal são valores de 600 mm de chuva por ano e em temperaturas médias de 18 a 28,5°C.

Iniciam a fase de produção de sementes com sete a oito meses, chegando à plena produção com dois a quatro anos. Essa produção depende do regime de chuvas, umidade e fertilidade do solo. Se o terreno for fresco, recebendo chuvas regulares, o pinhão-manso pode produzir o ano inteiro, tendo colheitas mensais. Em caso de regiões mais secas, os frutos podem ser colhidos de fevereiro a abril. O método mais prático e rápido de colheita dos frutos é fazendo vibrar a planta à meia altura, o que provoca a queda somente dos frutos maduros (DRUMMOND et al., 1984).

Em termos de produtividade, segundo Carnielli (2003), o pinhão-manso produz, pelo menos, duas toneladas de óleo por hectare.

### 2.1.2. Aspectos tecnológicos e industriais

Pelos motivos citados, o pinhão-manso é considerado uma matéria-prima potencial para a produção de biodiesel no Brasil, porém, atualmente, ainda não há tecnologia agrônômica e industrial consolidada (DURÃES E LAVIOLA, 2009).

O Brasil precisa de óleos de qualidade e assim, busca nas matérias-primas convencionais e potenciais, oportunidades para ofertar quantidades consistentes destes produtos e atender às crescentes demandas nacionais e globais (DURÃES E LAVIOLA, 2009).

As espécies convencionais são culturas "com domínio tecnológico" e cadeias produtivas em organização crescente ou consolidadas, onde a soja, girassol, mamona, algodão, dendê, contribuem neste cenário. Dentre as espécies potenciais, o pinhão manso (*Jatropha curcas* L.) tem sido considerado uma das alternativas de interesse, com acompanhamento, esforços e investimentos públicos e privados, e está em processo de expansão de cultivo, caracterizado pela iniciativa privada de plantio comercial e por ações técnico-científicas de domesticação objetivando transformá-la de espécie natural em espécie cultivada, com bases científicas (DURÃES E LAVIOLA, 2009)

No entanto, existem alguns desafios técnicos e científicos para a inserção do pinhão-manso na matriz energética de biocombustíveis no Brasil, que podem ser analisados através de três aspectos: 1) Tecnologia de produção e produtividade da cultura: necessidade de conhecimentos científicos que fundamentem e forneçam base genética aos descritores botânicos, melhoramento e sistemas de produção. 2) Limitações normativas para o cultivo do pinhão manso: registro de cultivares (RNC) e exploração comercial. 3) Qualidade do óleo vegetal e aproveitamento da torta: presença de fatores antinutricionais, alergênicos e tóxicos (como a curcina e ésteres de forbol) (DURÃES e LAVIOLA, 2009).

Para prover conhecimento e domínio tecnológico do cultivo de pinhão-manso, a Embrapa vem desde o ano de 2008 estruturando, coordenando e participando de projetos de pesquisa em redes nacionais e internacionais. Podem ser citados como principais projetos: "Fontes Alternativas de matérias primas para produção de agroenergia", financiado pela Embrapa, Petrobrás e Finep; "Pesquisa, Desenvolvimento e Inovação em Pinhão-Manso para Produção de Biodiesel -



BRJATROPHA”, com financiamento da Finep/MCTI (Ministério da Ciência, Tecnologia e Informação); “Jatropha curcas: Applied and Technological Research on Plant Traits – JATROPT”, com financiamento da União Européia. Estes projetos em conjunto com outros de menor porte geraram e estão gerando uma série de informações sobre o cultivo de pinhão-mansó (CAPDEVILLE e LAVIOLA, 2013).

O Plano de Pesquisa, Desenvolvimento e Inovação de Pinhão Manso descreve que os cultivos experimentais no Brasil são recentes. Embora existam espécies de plantas nativas indicando bons resultados em escala de laboratório, a produção de pinhão-mansó comercial conta com poucas áreas que possibilitem avaliar suas potencialidades nas distintas regiões brasileiras. Não somente o incremento das áreas de cultivo se faz necessário, mas também o fortalecimento da pesquisa de base, bem como o melhoramento genético para obtenção de variedades estáveis e mais produtivas da planta (FERREIRA et al. 2009).

Considerando-se outras ações como o melhoramento genético e o desenvolvimento de sistemas de manejo (adubação, podas, espaçamentos, viabilidade de consórcios, etc) atualmente os experimentos estão em fase de avaliação e serão necessários pelo menos dois a cinco anos para fechar um primeiro ciclo de pesquisa na espécie, considerando que o pinhão-mansó é uma planta perene, cuja produção comercial inicia-se após o quarto ano de cultivo (CAPDEVILLE e LAVIOLA, 2013).

### **2.1.3. Biodiesel de pinhão-mansó versus diesel de petróleo**

Experimentos realizados com o óleo extraído do pinhão-mansó em comparação com o diesel de petróleo apresentaram resultados satisfatórios. Num motor diesel, para gerar a mesma potência, o consumo de óleo de pinhão-mansó foi 20% superior, o ruído mais suave e a emissão de fumaça, semelhante. No entanto, a emissão de enxofre é cerca de dez vezes menor. Análises posteriores indicaram que o óleo de pinhão-mansó possui parâmetros semelhantes ao do combustível fóssil, com 83,9% do seu poder calorífico. Se o óleo de pinhão-mansó for usado

como substituto do diesel, o consumo será 16,1% maior, no entanto do ponto de vista ambiental, as vantagens são inúmeras (PINHÃO MANSO, 2014).

#### **2.1.4. Subprodutos**

A torta resultante da extração do óleo da semente pode ser aplicada como adubo natural nos próprios plantios da euforbiácea, pois além de enriquecer o terreno irá incorporar ao solo grandes quantidades de NPK, presentes em concentrações elevadas na torta, contribuindo para diminuição do consumo de fertilizantes químicos. Quando desintoxicada, a torta pode também ser transformada em ração, prática comum para a torta de mamona. Já a casca dos pinhões pode ser usada como carvão vegetal e matéria-prima na fabricação de papel, como adubo orgânico ou para queima nas caldeiras das indústrias de beneficiamento (TOMINAGA et al., 2007).

#### **2.1.5. Vantagens da cultura**

Outro aspecto positivo refere-se à possibilidade de armazenagem das sementes por longos períodos de tempo, sem os inconvenientes da deterioração do óleo por aumento da acidez livre, como acontece com os frutos de dendê ou macaúba, os quais devem ser processados o mais depressa possível (EPAMIG, 2003).

Outras vantagens do pinhão-manso são: rusticidade natural podendo crescer e sobreviver com poucos cuidados em solos de baixa fertilidade; crescimento rápido e planta de vida longa; planta de fácil propagação; o biodiesel produzido foi testado analiticamente e recebeu status de promissor; controle de erosão (redução da erosão do vento ou da água); melhoria da fertilidade do solo; aumento da renda para produtores rurais; redução da saída de dinheiro das áreas rurais para os centros urbanos; produção de energia nas áreas rurais; planta altamente adaptável, com grande habilidade para crescer em locais pobres e secos (PINHÃO MANSO, 2014).

### **2.1.6. Melhoramento genético do pinhão-mansão**

Atualmente, existem diversos trabalhos de pesquisas com o pinhão-mansão, entretanto, o grau de melhoramento desta espécie ainda é incipiente.

Recentemente, diferentes programas de melhoramento genético do pinhão-mansão foram implantados no Brasil. Estes programas têm se diferenciado principalmente quanto ao número de genótipos, tamanho de parcela e número de repetições utilizados, fatores que afetam as estimativas de parâmetros genéticos e a predição de ganhos de seleção (ABREU et al. 2009; JUHÁSZ et al. 2010; CARVALHO, 2010).

A utilização de métodos eficientes de melhoramento depende do conhecimento do controle genético dos caracteres a serem melhorados, tais como, número de genes que o governam, ações e efeitos gênicos, herdabilidade, repetibilidade e correlação entre os caracteres (HALLAUER, 2007).

Em um programa de melhoramento genético, é fundamental a determinação da variabilidade existente em relação aos caracteres de interesse. Para isto, é necessário que se tenha informações fenotípicas confiáveis avaliadas nos genótipos existentes.

O programa de melhoramento deve buscar a obtenção de cultivares com características que atendam às exigências dos produtores e do mercado. Para pinhão-mansão, o programa deve buscar, principalmente, cultivares que tenham maior produtividade em grãos e com alto teor de óleo. Esses dois caracteres são quantitativos, portando, influenciados pelo ambiente e devido a isso tendem a ter baixa herdabilidade. Caracteres como estes devem ser melhorados de forma gradual, ao longo de várias gerações (LAVIOLA, 2011).

Para que seja possível fazer seleção para teor de óleo em pinhão-mansão, é necessário o desenvolvimento de uma técnica que permita conhecer o teor de óleo das sementes de forma rápida e não-destrutiva, para que essas sementes possam ser utilizadas para outros estudos genéticos, o que não é possível com análises baseadas em métodos de extração sólido-líquido, que são inviáveis devido ao custo, tempo e principalmente, por serem destrutivos.

## 2.2. Espectroscopia no Infravermelho próximo

O termo espectroscopia refere-se à interação de qualquer tipo de radiação eletromagnética com a matéria. Por meio da análise do espectro, podemos obter informações relevantes sobre a estrutura molecular e modo de interação entre moléculas e a radiação eletromagnética. De acordo com o valor de energia da radiação eletromagnética, as transições entre os estados podem ser de vários tipos, dos quais as principais são as transições eletrônicas, vibracionais e rotacionais (OLIVEIRA, 2001).

O Infravermelho próximo corresponde a região posterior à do visível, compreende os comprimentos de onda de 750 a 2500 nm, com números de onda de 13300 a 4000  $\text{cm}^{-1}$ , respectivamente (PASQUINI, 2003).

O uso da espectroscopia NIR (“Near InfraRed Spectroscopy”) tem como objetivo principal obter informações qualitativas ou quantitativas de uma amostra, por meio da interação das ondas eletromagnéticas do infravermelho com os constituintes da amostra. As ocorrências espectrais na região do infravermelho próximo provêm de ligações em que o hidrogênio participa, o que torna a técnica útil para a determinação de compostos orgânicos contendo principalmente ligações C-H, O-H, N-H e S-H, sem que haja necessidade de pré-tratamento da amostra (PASQUINI, 2003).

A espectroscopia no NIR apresenta uma ampla diversidade de aplicações, tendo sido utilizada em diversas áreas, tais como, agrícola, médica, ambiental, petroquímica e farmacêutica. Quando comparada a outros métodos químicos, a espectroscopia NIR possui vantagens, pois, em geral, não necessita de preparação de amostras, não gera resíduo, é rápida e não destrutiva (GONZAGA, 2006).

A relação entre o resultado da resposta instrumental com a propriedade de interesse da amostra é denominada calibração. A equação matemática que descreve a relação é o modelo de calibração e a representação gráfica é chamada de curva analítica ou curva de calibração (PIMENTEL e NETO, 1996).

O processo de calibração consiste geralmente em duas etapas: a descritiva, que usa concentrações conhecidas para construir um modelo que relaciona a grandeza medida, com a concentração da espécie de interesse e a preditiva a qual

usa esse modelo para pressupor concentrações de novas amostras, a partir dos sinais analíticos mensurados por estas (PIMENTEL e NETO, 1996).

Para construir uma curva de calibração confiável, necessária para as leituras por NIR, é preciso um método de referência com boa reprodutibilidade e que forneça resultados que apresentem boa correlação com os espectros gerados pelo NIR. Também é desejável que a curva tenha uma amplitude considerável, isto é, que seja aplicável para um grande número de amostras, as quais podem ter os mais variados valores, sendo estes abrangidos pela curva. Na construção de uma curva de calibração, também se busca o menor desvio possível, ou seja, maior precisão dos resultados.

A espectrometria NIR apresenta-se como uma ferramenta eficaz para determinações analíticas. Entretanto, as bandas espectrais de baixa intensidade e muito sobrepostas, geradas por matrizes complexas, dificultam a obtenção de uma boa correlação entre grupos de átomos presentes numa molécula e a composição das amostras. Para tratamento das informações dos espectros gerados, é necessária a utilização de ferramentas quimiométricas, que utiliza métodos ou técnicas estatísticas para interpretar melhor os dados obtidos (NUNES, 2008; PEREIRA, 2007).

### **2.3. Cromatografia gasosa**

A cromatografia é um método físico-químico de separação. A técnica está fundamentada na migração diferencial dos componentes de uma mistura, que ocorre devido a diferentes interações, entre duas fases imiscíveis, a fase móvel e a fase estacionária. A grande variedade de combinações entre fases móveis e estacionárias a torna uma técnica extremamente versátil e de grande aplicação (DEGANI et al. 1998).

A cromatografia pode ser utilizada para a identificação de compostos, por comparação com padrões previamente existentes, para a purificação de compostos, separando-se as substâncias indesejáveis e para a separação dos componentes de uma mistura (DEGANI et al. 1998).

O principal mecanismo de separação da cromatografia gasosa está baseado na partição dos componentes de uma amostra entre a fase móvel gasosa e a fase estacionária líquida. A utilização de fases estacionárias sólidas, as quais levariam à separação por adsorção, apresenta poucas aplicações (DEGANI et al. 1998).

A cromatografia gasosa é uma das técnicas analíticas mais utilizadas. Além de possuir um alto poder de resolução, é muito atrativa devido à possibilidade de detecção em escala de nano a picogramas ( $10^{-9}$  -  $10^{-12}$  g). A grande limitação deste método é a necessidade de que a amostra seja volátil ou estável termicamente, embora amostras não voláteis ou instáveis possam ser derivadas quimicamente (DEGANI et al. 1998).

Os gases utilizados como fase móvel devem ter alta pureza e ser inertes em relação à fase estacionária. Hidrogênio, nitrogênio e hélio são os mais usados (DEGANI et al. 1998).

A injeção da amostra é feita através de microseringas ou válvulas. Os detectores de maior aplicação são o detector por ionização em chama e o detector de condutividade térmica. Os dados podem ser obtidos através de um registrador potenciométrico, um integrador ou um microcomputador, sendo as amostras identificadas por seus tempos de retenção (DEGANI et al. 1998).

Nesses equipamentos é necessário o controle da temperatura do injetor, da coluna e do detector, as quais são mantidas por termostatos. Como a temperatura é um fator extremamente importante, grande parte das análises por cromatografia gasosa é feita com programação de temperatura, obtendo-se melhor separação com picos mais simétricos em menor tempo (DEGANI et al. 1998).

O biodiesel produzido por determinada matéria-prima irá apresentar algumas propriedades peculiares originadas de seu óleo, pois a composição diversificada de seus ácidos graxos é um fator que influencia nas propriedades do biodiesel. Assim sendo, é necessário que haja a caracterização dos mesmos, pois cada biodiesel terá a sua característica própria quanto às propriedades físico-químicas da matéria prima que o origina (ARAÚJO et al., 2005).

#### **2.4. Análise multivariada**

A análise multivariada refere-se às técnicas estatísticas que analisam simultaneamente múltiplas características sobre indivíduos ou objetos. As variáveis devem ser aleatórias e inter-relacionadas de tal forma que seus efeitos não podem ser significativamente interpretados em separado. Os métodos multivariados podem ser classificados quanto a relação das suas variáveis em dependentes ou interdependentes. Na técnica de dependência uma variável é identificada como a variável dependente a ser explicada por outras variáveis conhecidas como variáveis independentes, como na análise de regressão. A interdependência é técnica cujo procedimento envolve a análise simultânea de todas as variáveis no conjunto, sem definir se a variável é independente ou dependente. Um exemplo desta categoria é a análise de componentes principais ou PCA (HAIR et al., 2009). A PCA tem sido utilizada como ferramenta em diversos estudos, dentre eles na avaliação da adaptabilidade e estabilidade de genótipos de soja (PELÚZIO et al., 2008) e na identificação de genótipos de soja resistentes a ferrugem asiática (MARTINS et al., 2007).

#### **2.4.1. Análise de componentes principais**

Dentre os métodos multivariados utilizados para reduzir a dimensionalidade dos dados, destaca-se a análise de componentes principais - PCA, cujo principal objetivo é explicar a estrutura de variâncias e covariâncias de uma matriz composta por  $p$  variáveis (JOHNSON; WICHERN, 2002).

A análise de componentes principais tem a finalidade de substituir um conjunto de variáveis correlacionadas por um conjunto de novas variáveis não correlacionadas, sendo essas combinações lineares das variáveis iniciais (FERRAUDO, 2010).

Para a determinação dos componentes principais, é necessário calcular a matriz de variância-covariância, ou a matriz de correlação ( $R$ ), encontrar os autovalores e os autovetores e, por fim, escrever as combinações lineares, que serão as novas variáveis independentes entre si e estimadas com o propósito de reter, em ordem de estimação e em termos da variação total, contida nos dados

iniciais (CRUZ; REGAZZI, 2001). Os componentes principais são ordenados em ordem decrescente da sua máxima variância, ou seja, o primeiro componente principal detém mais informação estatística que o segundo, que por sua vez tem mais informação estatística que o terceiro componente principal e assim por diante (MOITA NETO; MOITA, 1998).

Os autovetores, chamados de “loadings” (pesos) representam a contribuição com que cada um dos eixos originais entra na composição dos novos eixos, chamados de componentes principais. Os autovalores, por sua vez, representam a quantidade de variância original descrita pelos respectivos autovetores. Assim, o primeiro autovetor (o primeiro componente principal) representa um eixo no qual os pontos ou objetos, possuem máxima variância, um eixo ao longo do qual os pontos se encontram dispersos de forma máxima. O segundo componente principal é ortogonal ao primeiro, sendo o segundo eixo de maior variância, isto é, o eixo com máxima quantidade de variância não explicada pelo primeiro autovetor. A figura, formada pela projeção dos objetos nas componentes principais, é denominada de gráfico dos escores. Suas coordenadas são obtidas a partir do produto da matriz de dados pela matriz de autovetores. Se os dois ou os três primeiros autovetores explicarem uma quantidade significativa da variância total, um gráfico de escores em que eles são as coordenadas pode providenciar projeções acuradas em poucas dimensões, do espaço original de maior dimensão (SILVA et al., 2005).

#### **2.4.2. Análise de agrupamento**

A análise de agrupamento tem como finalidade principal agregar objetos com base nas características que estes possuem, classificando-os de modo que cada objeto é semelhante aos outros no agrupamento. Os agrupamentos resultantes devem exibir elevada homogeneidade dentro dos grupos e elevada heterogeneidade entre os grupos (HAIR et al., 2009).

Há inúmeros métodos de agrupamento, que se distinguem pelo tipo de resultado a ser fornecido e pelas diferentes formas de definir a proximidade entre um indivíduo e um grupo já formado ou entre dois grupos quaisquer (CRUZ;



CARNEIRO, 2006). Muitos são os algoritmos desenvolvidos para análise de agrupamentos e as duas abordagens principais são os métodos não hierárquicos e hierárquicos, sendo este último o mais utilizado.

Nos métodos hierárquicos a partir da matriz inicial de dados obtém-se uma matriz simétrica de similaridades e inicia-se a detecção de pares de indivíduos com a mais alta similaridade ou a mais baixa distância; para essa combinação, segundo níveis hierárquicos de similaridade, escolhe-se entre os diversos procedimentos aglomerativos de tal modo que cada ciclo de agrupamento obedeça a uma ordem sucessiva no sentido do decréscimo de similaridade. Na matriz inicial de coeficientes de similaridade estes representam o grau de semelhança entre pares de objetos e os mesmos deverão ser arranjados de acordo com os respectivos graus de similaridade de modo a ficarem agrupados segundo uma disposição hierárquica. Os resultados quando organizados em gráfico, formam uma estrutura de árvore denominada dendrograma, mostrando as relações dos indivíduos agrupados (LANDIM, 2000).

Há diversos métodos de agrupamento, sendo que, a diferença entre os mesmos está na forma de definir a proximidade entre um indivíduo e um grupo. Os métodos mais utilizados são: ligação simples, ligação completa, método não ponderado de agrupamento aos pares (UPGMA), método de Ward, dentre outros.

### 3. REFERÊNCIAS

ABREU, F.B.; RESENDE, M.D.V.de.; ANSELMO, J.L.; SATURNINO, H.M.; BRENHA, J.A.M.; FREITAS, F.B. de. Variabilidade genética entre acessos de pinhão-manso na fase juvenil. **Magistra**, v.21, p.36-40, 2009.

ARRUDA, F. P.; BELTRAO, N. E. M.; ANDRADE, A. P.; PEREIRA, W. E.; SEVERINO, L. S. Cultivo de pinhao-manso (*Jatropha curca* L.) como alternativa para o semi-arido nordestino. **Revista Brasileira de Óleo Fibrose**, Campina Grande, v. 8, n. 1, p. 789-799, 2004.

BRASIL. Ministério da Indústria e do Comércio. Secretaria de Tecnologia Industrial. **Produção de combustíveis líquidos a partir de óleos vegetais**. Brasília, DF, 1985. 364 p. Documentos n. 16.

CAPDEVILLE, G.; LAVIOLA, B. **Pinhão Manso: insucesso ou erro de estratégia?** 2013. Disponível em: <<http://www.biodieselbr.com/noticias/materia-prima/jatropha/pinhao-manso-insucesso-erro-estrategia-100913.htm>> Acesso em: 13 fev. 2014.

CARNIELLI, F. **O combustível do futuro**. Belo Horizonte: UFMG, 2003. v. 29. Boletim, n. 1413. Disponível em: <<https://www.ufmg.br/boletim/bol1413/quarta.shtml/>>. Acesso em: 01 fev. 2014.

CARVALHO, D.S. **Comportamento genético de progênes de meios irmãos de pinhão manso no recôncavo baiano, Brasil**. 2010. 41f. Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Recôncavo da Bahia, Cruz das Almas, 2010.

CORTESAO, M. **Culturas tropicais: plantas oleaginosas**. Lisboa: Classica, 1956. 231 p.

CRUZ, C.D.; CARNEIRO, P.C.S. **Modelos biométricos aplicados ao melhoramento genético**. 2.ed. Viçosa: UFV, 2006. 585p.

CRUZ, C. D.; REGAZZI, A. J. **Modelos biométricos aplicados ao melhoramento genético**. Viçosa: UFV, 2001.

DEGANI, A. L. G.; CASS, Q. B.; VIEIRA, P. C. Cromatografia: um breve ensaio. **Química Nova na Escola**. n. 7, p. 21-25, 1998.

DRUMMOND, O. A.; PURCINO, A. A. C.; CUNHA, L. H. S.; VELOSO, J. M. **Cultura do pinhão manso**. Belo Horizonte: EPAMIG, 1984. n. 131, 6 p.

DURÃES, F. O.; LAVIOLA, B. **Pinhão Manso: matéria prima potencial para produção de biodiesel no Brasil**. Disponível em: <<http://www.embrapa.br/imprensa/artigos/2009/ADM-1%20Pinhao-manso%20%20materiaprima%20potencial%20para%20producao%20de%20biodiesel%20no%20Brasil.doc/view>> Acessado em: 14/02/2014. 5p, 2009.

EPAMIG - EMPRESA DE PESQUISA AGROPECUARIA DE MINAS GERAIS. **Coletânea sobre pinhão-manso, na EPAMIG**. [Belo Horizonte]: Epamig, 2003. Disponível em: <[www.epamig.br/index.php?option=com\\_docman&task=doc\\_download&gid=14&Itemid=116](http://www.epamig.br/index.php?option=com_docman&task=doc_download&gid=14&Itemid=116)>. Acesso em: 24 jan. 2014.

FERRAUDO, A. S. Técnicas de análise multivariada – uma introdução. Apostila, 2010. 72p.

FERREIRA, W. J.; BATISTA, J. T.; CASTRO, C. M.; DEVIDE, A. C. P. Biodiesel de Pinhão-manso (*Jatropha curcas* L.) em países emergentes: alternativa para o desenvolvimento regional. **Revista Brasileira de Gestão e Desenvolvimento Regional**, Taubaté, v.9, n. 1, p. 3-16, 2009.

GONZAGA, F. B. **Desenvolvimento de um Espectrômetro de Emissão para a Região no Infravermelho Próximo**. Campinas, 2006. 117p. Tese (Doutorado em Química) - Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas.

HAIR, J.F.; BLACK, W.; BABIN, B.; ANDERSON, R.E.; TATHAM, R.L. **Análise Multivariada de dados**. Editora Bookman, Porto Alegre, 6ª ed., 2009.

HALLAUER, A.R. History, contribution, and future of quantitative genetics in plants breeding: lessons from maize. **Crop Science**, v.47, p.04-19, 2007.

JOHNSON, R. A.; WICHERN, D.W. **Applied multivariate statistical analysis**. 5. ed. New Jersey: Prentice Hall, 2002. 767p.

JUHÁSZ, A.C.P.; MORAIS, D.L.B.; SOARES, B.O.; PIMENTA, S.; RABELLO, H.O.; RESENDE, M.D.V.de. Parâmetros genéticos e ganho de seleção para populações de pinhão manso (*Jatropha curcas*). **Pesquisa Florestal Brasileira**, v.30, p.25-35, 2010.

LANDIM, P.M.B. **Análise estatística de dados geológicos multivariados**. Lab. Geomatemática, DGA, IGCE, UNESP/ Rio Claro, Texto Didático 03, 128pp. 2000. Disponível em <http://www.rc.unesp.br/igce/aplicada/textodi.html>. Acesso em 10 de fevereiro de 2014.

LAVIOLA, B. G. **Diretrizes para o melhoramento de pinhão-manso visando a produção de biocombustíveis**. 2011. Disponível em: <<http://www.embrapa.br/imprensa/artigos/2010/diretrizes-para-o-melhoramento-de-pinhao-manso-visando-a-producao-de-biocombustiveis/>> Acessado em: 21 jan. 2014.

MARTINS, J. A. S.; JULIATTI, F. C.; SANTOS, V. A.; POLIZEL, A. C.; JULIATTI, F. C. Período latente e uso da análise de componentes principais para caracterizar resistência parcial à ferrugem da soja. **Summa Phytopathologica**, Botucatu, v. 33, n.4, p.364-371, 2007.

MOITA NETO, J. M.; MOITA, G. C. Uma introdução à análise exploratória de dados multivariados. **Química Nova**, São Paulo, v.21, n.4, 1998.

NUNES, P. G. A. **Uma nova técnica para seleção de variáveis em calibração multivariada aplicada às espectroscopias UV-VIS e NIR**. João Pessoa, 2008. 106p. Tese de Doutorado, Universidade Federal da Paraíba.

OLIVEIRA, L. F. C. **Espectroscopia Molecular**. Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola. n. 4, 2001.

PASQUINI, C. Near Infrared Spectroscopy: Fundamentals, Practical Aspects and Analytical Applications. Campinas-SP: **Journal of the Brazilian Chemical Society**, v. 14,p.198-219, 2003.

PAZETO, M. S. R. **Estudo da diversidade genética entre acessos de *Jatropha* spp. por meio de caracteres morfológicos e marcadores moleculares ISSR.** Jaboticabal, 2013. 73p. Tese de Doutorado, Universidade Estadual Paulista.

PEIXOTO, A. R. **Plantas oleaginosas arbóreas.** Sao Paulo: Nobel, 1973. 284 p.

PELÚZIO, J.M.; FIDELIS, R. R.; GIONGO, P. R.; SILVA, J. C.; CAPPELLARI, D.; BARROS, H. B. Análise de regressão e componentes principais para estudo da adaptabilidade e estabilidade em soja. **Scientia Agraria**, Curitiba, v.9, p.455-462, 2008.

PEREIRA, A. F. C. **Determinação simultânea de acidez, índice de refração e viscosidade em óleos vegetais usando espectrometria NIR, calibração multivariada e seleção de variáveis.** 2007. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal da Paraíba.

PIMENTEL, M. F.; NETO, B. B. Calibração: Uma revisão para químicos analíticos. **Química Nova**, v. 19, n. 3, p. 268-277, 1996.

PINHAO MANSO. **A planta:** pinhao manso – *Jatropha curcas*. [S.l.]: Biodieselbr Online. Disponível em: <<http://www.pinhaomanso.com.br/pinhaomanso.html>>. Acesso em: 01 fev. 2014.

SATURNINO, H. M.; PACHECO, D. D.; KAKIDA, J.; TOMINAGA, N.; GONCALVES, N. P. Cultura de pinhão-manso (*Jatropha curcas* L.). **Informe Agropecuário Epamig**, Belo Horizonte, v. 26, n. 229, p. 44-78, 2005.

SILVA, J. B. P.; MALVESTITI, I.; HALLWASS, F.; RAMOS, M. N. Aplicação de análise de componentes principais para verificação de atribuições de sinais nos espectros de Rmn 1H. O caso dos 3-aril (1,2,4)-oxadiazol-5-carboidrazida benzilidenos. **Química Nova**, São Paulo, v. 28, n. 3, p. 492-496, 2005.

TEIXEIRA, J. P. F. Teor e composição do óleo de sementes de *Jatropha* spp. **Bragantia**, Campinas, v. 46, p. 151-157, 1987.

TOMINAGA, N.; KAKIDA, J.; YASUDA, E. K. **Cultivo de pinhão-manso para produção de biodiesel.** Viosa, MG: CPT, 2007. 220 p.

## CAPÍTULO 2 – CONSTRUÇÃO DE CURVA DE CALIBRAÇÃO PARA TEOR DE ÓLEO POR NIR E PERFIL COMPOSICIONAL DO ÓLEO POR CROMATOGRAFIA GASOSA EM *Jatropha curcas* L.

**RESUMO** – Objetivou-se neste trabalho estabelecer uma curva de calibração para predição do teor de óleo de pinhão-manso, através da espectroscopia no infravermelho próximo (NIR), bem como traçar o perfil composicional do óleo de pinhão-manso por cromatografia gasosa. Foram utilizadas sementes de 142 plantas, que tiveram óleo extraído pelo equipamento ANKOM modelo XT15, para obtenção dos valores de referência, que ficaram entre 29,32 a 49,69% (m/m) de óleo. Os espectros foram coletados de sementes sem tegumento, intactas, por acessório de rotação, em um equipamento NIR do Fabricante Bruker, modelo Tango. Cada espectro foi retirado com uma média de 64 scans com resolução de  $16\text{ cm}^{-1}$ . As regiões espectrais selecionadas para a curva de calibração foram de 8344 a  $7736\text{ cm}^{-1}$ , 6072 a  $4968\text{ cm}^{-1}$  e 4520 a  $3976\text{ cm}^{-1}$ . Para avaliar a precisão da curva foi calculado o coeficiente de correlação ( $R^2$ ) que foi de 71,26% e o erro padrão de calibração (RMSECV) que foi de 0,138 entre os dados obtidos pelo método de referência e pelo NIR. Os resultados obtidos indicam que o método de referência utilizado foi satisfatório, apresentando boa correlação com a informação espectral, tornando a curva construída confiável, necessitando, entretanto da adição de novos dados para incremento na sua robustez e amplitude. A cromatografia gasosa mostrou que os ácidos graxos com maiores porcentagens foram: oléico (43,45%), linoléico (35,13%), palmítico (13,44%) e esteárico (6,30%), concluindo que o perfil composicional do pinhão-manso é predominantemente insaturado.

**Palavras-chave:** pinhão-manso, análise não-destrutiva, ácidos graxos.

## 1. INTRODUÇÃO

Em pinhão-mansão, um dos caracteres mais importantes a serem analisados é o teor de óleo. A análise de teor de óleo de oleaginosas pode ser realizada por gravimetria. Entretanto, este método requer que a amostra seja previamente submetida a procedimentos de extração sólido-líquido (PEREIRA, 2009), tornando-se inviável devido ao custo e ao tempo, quando se existe a necessidade de análises em grande escala. Em programas de melhoramento genético, esta questão é ainda mais discutível, pelo fato dos métodos que envolvem procedimentos de extração necessitarem da destruição das sementes, que na maioria das vezes, são necessárias para os estudos genéticos, tornando os métodos inadequados.

Desta maneira, um método analítico que tem sido utilizado para determinação do teor de óleo (VAKNIN et al., 2011) é a espectroscopia no infravermelho próximo (NIR), que é uma técnica rápida, em geral não necessita de preparo de amostras, não gera resíduos e não é destrutiva (GONZAGA, 2006), apresentando grande vantagem com relação a outros métodos de análise química, tornando este método adequado, principalmente para estudos de teor de óleo em programas de melhoramento genético.

No entanto, para que seja possível a determinação de um dado componente, é necessária a construção de uma curva de calibração (FERREIRA et al. 1999), que correlaciona as informações espectrais obtidas por NIR com dados de referência, ou seja, dados obtidos por métodos analíticos de referência, que são geralmente destrutivos. Sem a curva de calibração, o NIR irá apenas gerar o espectro da amostra, sem valores para os componentes da mesma.

Por sua vez, para se conhecer a composição do óleo, uma técnica bastante aplicada é a cromatografia gasosa. A cromatografia gasosa possui um alto poder de resolução e é muito atrativa devido à possibilidade de detecção em uma escala de nano à picogramas (DEGANI et al., 1998). Depois que uma amostra é submetida à análise cromatográfica, é possível dizer quais ácidos graxos estão presentes no óleo e suas respectivas porcentagens, determinando assim, se o óleo é adequado para a produção de biodiesel.

Sendo assim, objetivou-se com o presente trabalho construir uma curva de calibração para predição do teor de óleo por espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) e traçar o perfil composicional do óleo de pinhão-manso por cromatografia gasosa.

## 2. MATERIAL E MÉTODOS

### 2.1. Construção da curva de calibração

Para construção da curva de calibração, foram utilizadas sementes de 142 plantas, oriundas de 56 genótipos, listados na Tabela 1. As sementes foram coletadas entre janeiro e fevereiro de 2013 e pertencem ao Banco de Germoplasma *ex-situ* que situa-se no Departamento de Produção Vegetal, na Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias da Universidade Estadual Paulista - UNESP, Câmpus de Jaboticabal, SP.

**Tabela 1.** Identificação, procedência e número de plantas de cada genótipo de pinhão-manso utilizado neste estudo. Jaboticabal – SP, 2014

Identificação	Código do Acesso	Procedência	Latitude	Longitude	Nº Plantas Utilizadas
Acesso 1	CNPA PM IV P1	Tocantinópolis - TO	06°19'S	47°24'W	4
Acesso 2	CNPA PM IV P2	Tocantinópolis - TO	06°19'S	47°24'W	1
Acesso 4	CNPA PM II P2	Garanhuns - PE	08°56'S	36°30'W	1
Acesso 5	CNPA PM II P3	Garanhuns - PE	08°56'S	36°30'W	2
Acesso 6	CNPA PM II P4	Garanhuns - PE	08°56'S	36°30'W	3
Acesso 7	CNPA PM II P5	Garanhuns - PE	08°56'S	36°30'W	4
Acesso 8	CNPA PM II P6	Garanhuns - PE	08°56'S	36°30'W	4
Acesso 9	CNPA PM II P7	Garanhuns - PE	08°56'S	36°30'W	3
Acesso 10	CNPA PM II P8	Garanhuns - PE	08°56'S	36°30'W	1
Acesso 12	CNPA PM II P12	Garanhuns - PE	08°56'S	36°30'W	4
Acesso 13	CNPA PM II P16	Garanhuns - PE	08°56'S	36°30'W	2
Acesso 15	CNPA PM II P19	Garanhuns - PE	08°56'S	36°30'W	1
Acesso 16	CNPA PM II P20	Garanhuns - PE	08°56'S	36°30'W	1
Acesso 17	CNPA PM II P21	Garanhuns - PE	08°56'S	36°30'W	2
Acesso 18	CNPA PM II P22	Garanhuns - PE	08°56'S	36°30'W	3

Acesso 20	CNPA PM II P25	Garanhuns - PE	08°56'S	36°30'W	1
Acesso 23	CNPA PM II P31	Garanhuns - PE	08°56'S	36°30'W	1
Acesso 24	CNPA PM XI P1	Mundo Novo - PE	07°35'S	37°11'W	3
Acesso 25	CNPA PM XI P2	Mundo Novo - PE	07°35'S	37°11'W	4
Acesso 26	CNPA PM XI P3	Mundo Novo - PE	07°35'S	37°11'W	4
Acesso 27	CNPA PM XI P4	Mundo Novo - PE	07°35'S	37°11'W	2
Acesso 29	CNPA PM VII P2	Mundo Novo - PE	07°35'S	37°11'W	5
Acesso 30	CNPA PM VII P6	Mundo Novo - PE	07°35'S	37°11'W	2
Acesso 31	CNPA PM VII P7	Mundo Novo - PE	07°35'S	37°11'W	2
Acesso 32	CNPA PM IX P1	Pugmil - TO	06°24'S	37°48'W	1
Acesso 33	CNPA PM IX P2	Pugmil - TO	06°24'S	37°48'W	1
Acesso 34	CNPA PM IX P3	Pugmil - TO	06°24'S	37°48'W	1
Acesso 37	CNPA PM IX P6	Pugmil - TO	06°24'S	37°48'W	1
Acesso 38	CNPA PM IX P7	Pugmil - TO	06°24'S	37°48'W	1
Acesso 39	CNPA PM IX P8	Pugmil - TO	06°24'S	37°48'W	3
Acesso 40	CNPA PM VIII P1	Alagoinha - PB	06°57'S	35°32'W	7
Acesso 41	CNPA PM VIII P2	Alagoinha - PB	06°57'S	35°32'W	4
Acesso 42	CNPA PM VIII P4	Alagoinha - PB	06°57'S	35°32'W	5
Acesso 43	CNPA PM VIII P5	Alagoinha - PB	06°57'S	35°32'W	4
Acesso 44	CNPA PM VI P1	Oliveira de Fátima - TO	10°42'S	48°54'W	4
Acesso 45	CNPA PM VI P2	Oliveira de Fátima - TO	10°42'S	48°54'W	2
Acesso 46	CNPA PM VI P3	Oliveira de Fátima - TO	10°42'S	48°54'W	2
Acesso 47	CNPA PM VI P5	Oliveira de Fátima - TO	10°42'S	48°54'W	1
Acesso 48	CNPA PM VI P6	Oliveira de Fátima - TO	10°42'S	48°54'W	3
Acesso 49	CNPA PM VI P7	Oliveira de Fátima - TO	10°42'S	48°54'W	2
Acesso 50	CNPA PM VI P8	Oliveira de Fátima - TO	10°42'S	48°54'W	2
Acesso 51	CNPA PM X P1	Marizópolis - PB	09°47'S	49°39'W	5
Acesso 52	CNPA PM X P2	Marizópolis - PB	09°47'S	49°39'W	3
Acesso 53	CNPA PM X P3	Marizópolis - PB	09°47'S	49°39'W	6
Acesso 54	CNPA PM X P4	Marizópolis - PB	09°47'S	49°39'W	3
Acesso 55	IT 1	Ituverava - SP	20°20'S	47°46'W	2
Acesso 56	IT 2	Ituverava - SP	20°20'S	47°46'W	2
Acesso 57	IT 3	Ituverava - SP	20°20'S	47°46'W	3
Acesso 58	IT 4	Ituverava - SP	20°20'S	47°46'W	2
Acesso 59	IT 5	Ituverava - SP	20°20'S	47°46'W	2
Acesso 60	IT 6	Ituverava - SP	20°20'S	47°46'W	1
Acesso 61	IT 7	Ituverava - SP	20°20'S	47°46'W	3
Acesso 62	IT 8	Ituverava - SP	20°20'S	47°46'W	1
Acesso 63	IT 9	Ituverava - SP	20°20'S	47°46'W	2
Acesso 64	IT 10	Ituverava - SP	20°20'S	47°46'W	2
Acesso 65	IT 11	Ituverava - SP	20°20'S	47°46'W	1

Após a coleta das sementes, foram retirados os tegumentos das mesmas, para a obtenção dos espectros em equipamento NIR, modelo Tango, da marca



Bruker. Foi utilizado acessório de rotação pequeno, com resolução de  $16 \text{ cm}^{-1}$  e média de 64 scans por leitura. Cada planta teve seu espectro coletado em duplicata.

A análise quimiométrica dos dados obtidos foi realizada no Software OPUS, o qual avalia o melhor método quimiométrico para análise de regressão dos dados, bem como o tratamento dos espectros. Os métodos propostos foram avaliados com base no erro médio quadrático (RMSECV) e na correlação ( $R^2$ ) entre a informação espectral e os valores de referência (método destrutivo). O modelo aprovado refere-se ao que levou ao menor valor possível de RMSECV e maior  $R^2$ .

## **2.2. Extração de óleo**

Foram testados dois métodos para extração do óleo: Soxhlet e extrator automático. Seis amostras tiveram seu óleo extraído em duplicata pelas duas metodologias. O método Soxhlet apresentou uma variação média de 5,72% entre as repetições, enquanto o extrator automático apresentou uma variação média de 1,17%. Por esse motivo, além de outros aspectos como tempo de refluxo e quantidade de solvente utilizada, o último método foi escolhido para realização das extrações de óleo deste estudo.

A extração do óleo das sementes também foi realizada em duplicata pelo extrator automático da marca ANKOM, modelo XT15. Para a realização da extração, as mesmas sementes utilizadas para obtenção dos espectros no NIR foram moídas em moinho portátil, da marca IKA, modelo A11 e em seguida foram pesados de 1,5 a 2 gramas de cada amostra, colocados em papel filtro ANKOM X14 e seladas. Então, as amostras permaneceram em estufa a  $105^\circ\text{C}$  por 30 minutos. Posteriormente, foram transferidas para um dessecador, pesadas novamente e então, tiveram o óleo extraído utilizando-se éter de petróleo como solvente. Terminado o ciclo de extração, as amostras foram transferidas para estufa a  $105^\circ\text{C}$  por 30 minutos para evaporação do éter e depois foram obtidas as massas finais. Foi calculada a média das duplicatas, sendo este valor correlacionado com os espectros obtidos na leitura do equipamento Tango-NIR.

### 2.3. Determinação do perfil composicional do óleo de pinhão-mansó

A determinação do perfil composicional do óleo de pinhão-mansó foi realizada por cromatografia gasosa, empregando-se o óleo extraído de dez plantas, que foram utilizadas para a construção da curva de calibração. Essa análise requereu a transesterificação do óleo, que foi realizada de acordo com a norma ISO 12966-2.

A separação dos ésteres dos ácidos graxos foi feita em um cromatógrafo gasoso da marca Shimadzu, modelo CG 2010, com uma coluna Stabilwax (30 m x 0,32 mm x 0,25 µm) e acoplado a um detector de ionização por chama. Foi usada injeção modo Split (razão de 1:20), com volume de injeção de 1 µL e temperatura do injetor de 250 °C. A temperatura da coluna foi programada para 60 °C, aquecendo 20 °C/min até 210 °C (7 min), depois, um novo aquecimento de 30 °C/min até 250 °C (12 min). O hélio foi utilizado como gás de arraste com fluxo constante de 1,2 mL/min. A temperatura do detector também foi fixada em 250 °C. Os padrões de ésteres utilizados na identificação dos compostos estão listados na Tabela 2.

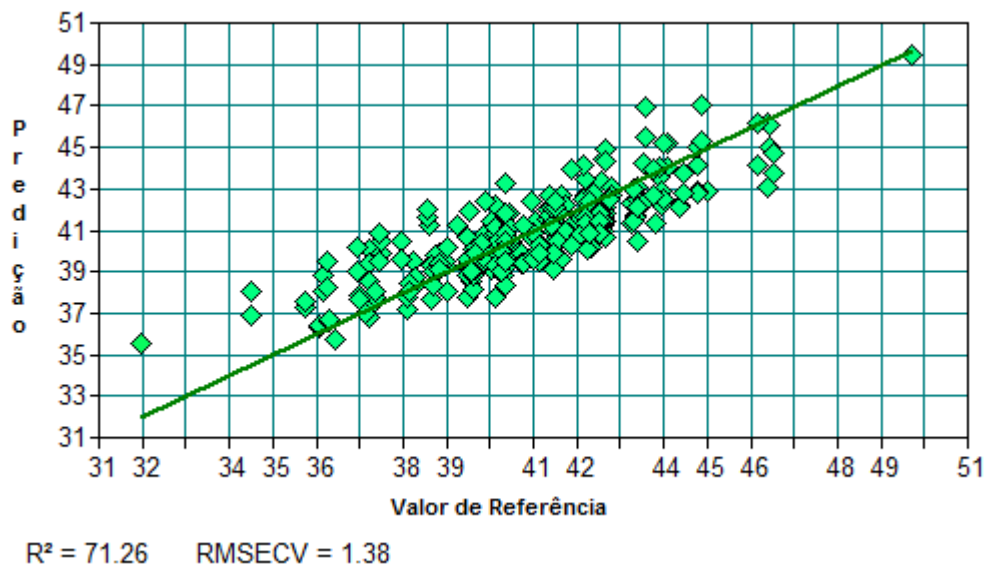
**Tabela 2.** Padrões de ésteres utilizados na identificação dos compostos da amostra de óleo de pinhão-mansó por cromatografia gasosa. Jaboticabal – SP, 2014

Padrões da Empresa Nu-Check - U.S.A.	
Éster	Código
C6:0	N-6-M
C8:0	N-8-M
C10:0	N-10-M
C11:0	N-11-M
C12:0	N-12-M
C14:0	N-14-M
C16:0	N-16-M
C16:1	U-40-M
C17:0	N-17-M
C18:0	N-18-M
C18:1	U-44-M
C18:2	U-59-M
C18:3	U-62-M
C19:0	N-19-M
C20:0	N-20-M
C22:0	N-22-M
C22:1	U-79-M
C24:0	N-24-M
C24:1	U-88-M

### 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

#### 3.1. Construção de curva de calibração

A curva que mais se ajustou aos parâmetros desejados, ou seja, maior  $R^2$  e menor RMSECV, apresentou uma correlação de 71,26 % e um erro médio de 0,138. Esse modelo utilizou a 1ª derivada para tratamento dos espectros. As regiões selecionadas para a construção desse modelo foram de 8344 a 7736  $\text{cm}^{-1}$ , 6072 a 4968  $\text{cm}^{-1}$  e 4520 a 3976  $\text{cm}^{-1}$ . Na Figura 1 encontra-se a curva escolhida.

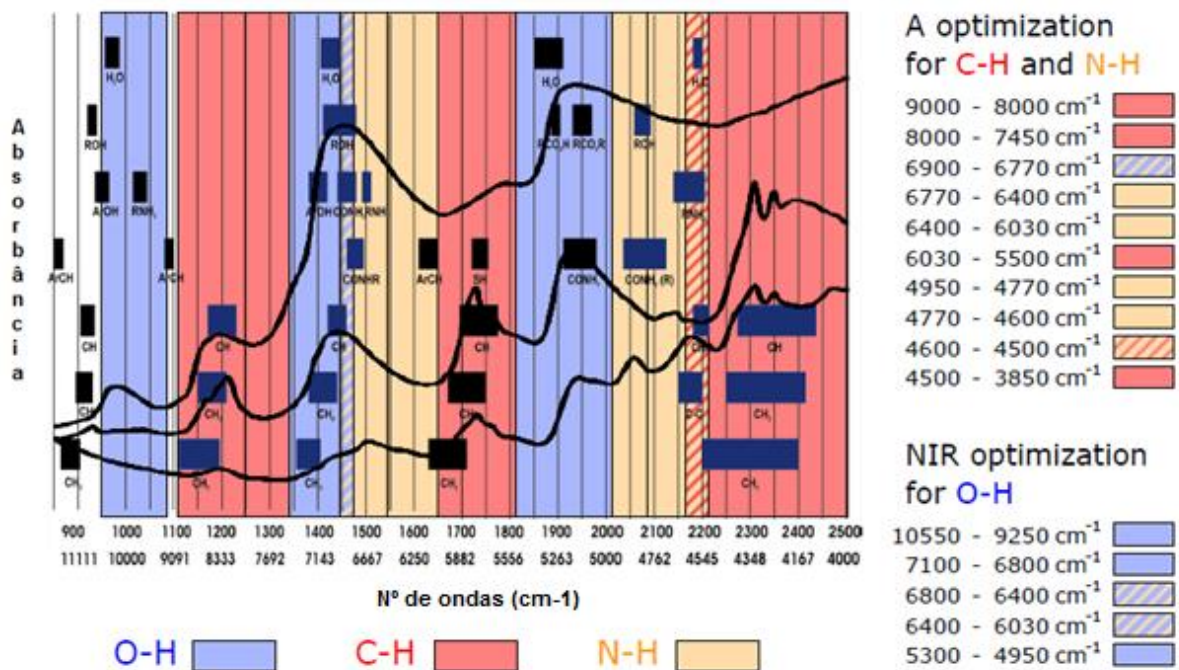


**Figura 1.** Curva de calibração para predição do teor de óleo de pinhão-manso. Jaboticabal – SP, 2014

Um aspecto crucial para a construção de uma boa curva de calibração, é que a mesma seja representativa da população para a qual será utilizada e que apresente uma amplitude considerável, visto que, quanto maior a amplitude da curva, mais genótipos poderão ser analisados pela mesma. Neste estudo, foram utilizadas sementes de 142 plantas, nas quais o teor de óleo variou de 29,32 % a 49,69 % nos indivíduos analisados. Este intervalo é considerado uma boa amplitude, que provavelmente abrangeria uma grande quantidade de genótipos. Porém, como pode ser observado na Figura 1, a maioria dos dados estão concentrados numa

faixa de 36 a 45 %. Para que se obtenha maior robustez, é importante que os dados estejam bem distribuídos por toda a faixa de abrangência. Isto é conseguido incorporando novos genótipos à curva, ou mesmo adicionando dados de outros anos agrícolas, visto que, como o pinhão-manso é uma espécie alógama, a cada ciclo reprodutivo, os alelos são partilhados de forma aleatória, apesar de fazerem parte do mesmo conjunto gênico da população, ou seja, as sementes produzidas em uma planta em um determinado ano, podem não possuir exatamente o mesmo genótipo no ano seguinte.

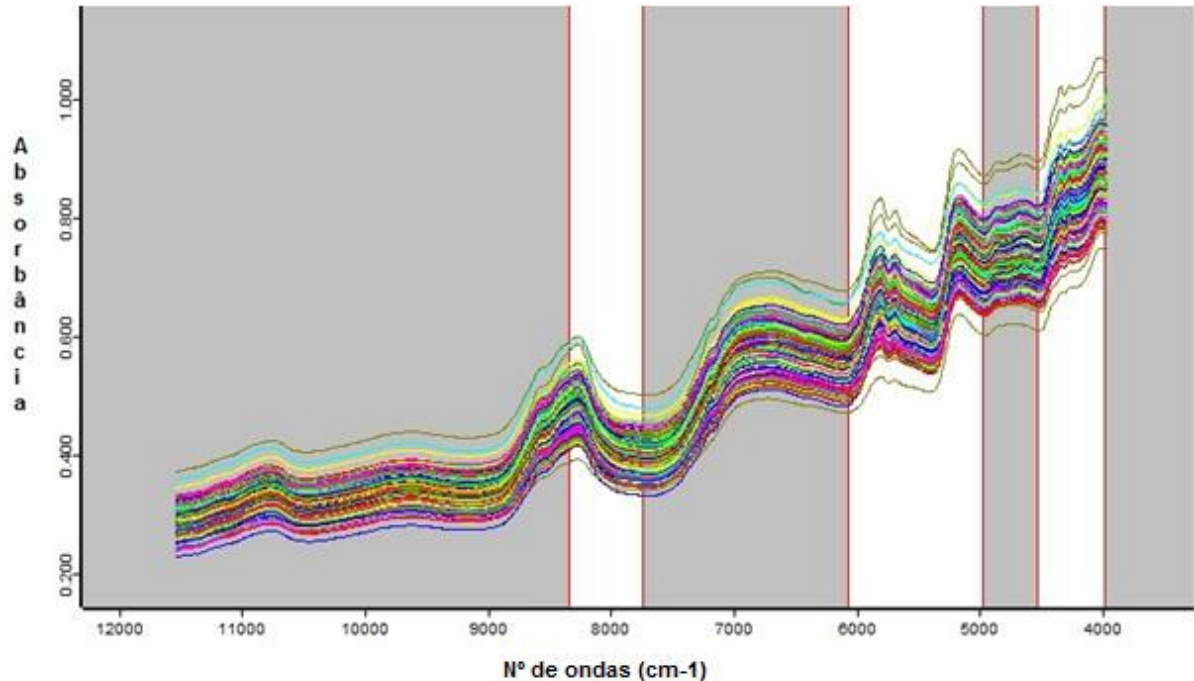
Para desenvolver uma curva de calibração confiável, também é necessário que se saiba selecionar corretamente as regiões do espectro. As regiões que devem ser selecionadas de acordo com a composição química do constituinte de interesse podem ser visualizadas na Figura 2.



**Figura 2.** Regiões de otimização de acordo com a composição do componente de interesse. Jaboticabal – SP, 2014

Tendo em vista que o interesse com o presente trabalho é a determinação do teor de óleo, é necessário selecionar somente às regiões do espectro que contém informações relativas às ligações C-H.

As regiões que foram selecionadas nos espectros das sementes de pinhão-mansó podem ser conferidas na Figura 3.



**Figura 3.** Espectros das amostras de pinhão-mansó e suas regiões selecionadas para calibração. Jaboticabal – SP, 2014

Também é de suma importância que haja a avaliação e o possível descarte amostras anômalas, bem como a aplicação de tratamentos matemáticos (HEIN et al. 2010).

Neste estudo, a curva de calibração que apresentou os melhores parâmetros, identificou 12 plantas como amostras anômalas, que tiveram seus dados excluídos do modelo de calibração, inclusive a amostra que apresentou o menor teor de óleo, diminuindo a amplitude da curva.

Diversos estudos relatam sucesso no desenvolvimento de curvas de calibração no procedimento NIR nos mais variados materiais e componentes, a saber: propriedades da madeira (HEIN et al. 2010), determinação de hidrocarbonetos no gás natural (FRANCO, 2008), teor de cinzas em legumes (POJIC et al. 2010), análise de plumas e tecidos de algodão (SOUSA, 2013), evidenciando

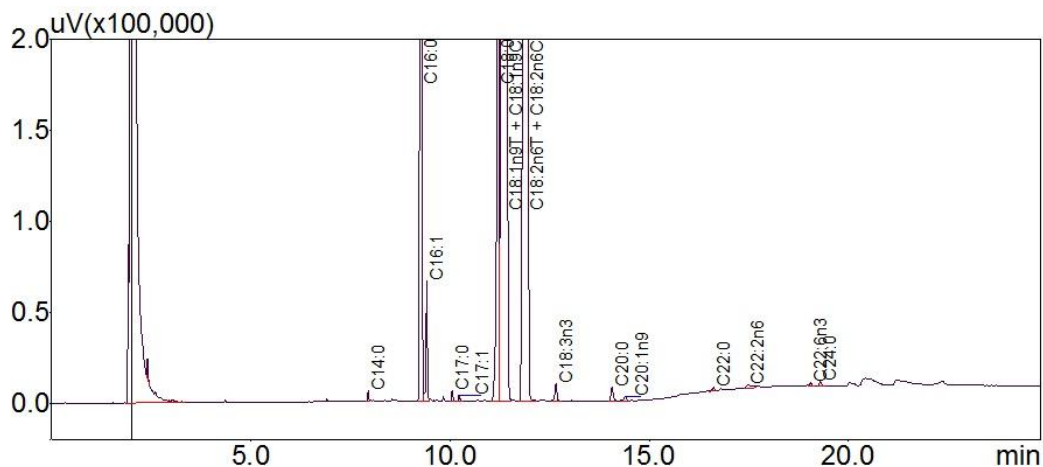
assim, que a espectroscopia no infravermelho próximo é uma técnica versátil e vantajosa.

Em trabalhos voltados para a produção de biodiesel, o NIR foi utilizado para identificação de óleos vegetais em espécies de *Jatropha* a saber: *Jatropha curcas*, *Jatropha molissima* e *Jatropha gossypifolia* (BARROS et al. 2012), determinação do biodiesel de quatro tipos de óleo: algodão, girassol, soja e canola (VERAS et al. 2010), teor de óleo de girassol (GRUNVALD et al. 2009) determinação de ácidos graxos em óleos vegetais (RASPE et al. 2011), entre outros.

No que se diz respeito ao pinhão-mansão, já foram realizados estudos para determinação da qualidade dos grãos (MONTES et al. 2013), predição do teor de óleo, proteína, e composição do óleo (VAKNIN et al. 2011). Este último, avaliou 74 amostras de sementes. Cada semente teve seu espectro obtido em um ângulo de 45°, em duplicata: uma com o embrião virado para cima, outra com o embrião virado para baixo. Os autores relataram um  $R^2$  de 91 % ao calcularem a média das correlações obtidas pelas calibrações separadas de ambos os métodos de coleta dos espectros, concluindo que o NIR pode ser aplicado com sucesso para seleção de sementes de pinhão-mansão em programas de melhoramento.

### 3.2. Análise cromatográfica

O cromatograma da amostra de óleo extraída das sementes de pinhão-mansão está representado na Figura 4.



**Figura 4.** Cromatograma do óleo de pinhão-mansão

Os ácidos graxos encontrados no perfil composicional e suas respectivas porcentagens estão listados na Tabela 3.

**Tabela 3.** Identificação dos ácidos graxos e suas porcentagens presentes no óleo de pinhão-mansão. Jaboticabal – SP, 2014

	Ácidos Graxos	% (m/m)
Mirístico	C14:0	0,05
Palmítico	C16:0	13,44
Palmitoleico	C16:1	0,83
Margárico	C17:0	0,08
Heptadecanóico	C17:1	0,05
Estearíco	C18:0	6,3
Oleico	C18:1n9T + C18:1n9C	43,45
Linoleico	C18:2n6T + C18:2n6C	35,13
Jacárico	C18:3n3	0,18
Araquídico	C20:0	0,17
<i>Eicosenóico</i>	C20:1n9	0,06
Behenico	C22:0	0,05
Docosadienóico	C22:2n6	0,11
Cervônico	C22:6n3	0,05
Lignocérico	C24:0	0,06

Dos ácidos graxos encontrados no óleo de pinhão-mansão, cerca de 99,5 % foram ácidos de cadeias longas, com 16 a 24 átomos de carbono. Dos 15 compostos determinados, 13 foram de ácidos graxos de cadeia par, perfazendo 86,67 % da fração de ácidos graxos. As frações predominantes foram constituídas pelos ácidos palmítico (13,44 %), esteárico (6,30 %), oléico (43,45 %) e linoléico (35,13 %), somando 98,32 % do total. Dos 15 ácidos listados, sete são saturados e oito insaturados, representando 20,15 % e 79,85 % do total, respectivamente.

Outros autores também relataram a presença dos ácidos palmítico, esteárico, oléico e linoléico no óleo de pinhão-manso (LEMÕES et al. 2011; MELO, 2007; MONTES et al. 2013; OLIVEIRA et al. 2009; TEIXEIRA, 1987; VAKNIN et al. 2011). Os ácidos que apresentam maiores porcentagens são oléico (MELO, 2007; MONTES et al. 2013; VAKNIN et al. 2011) e o linoléico (LEMÕES et al. 2011; OLIVEIRA et al. 2009; TEIXEIRA, 1987). O ácido palmitoléico também é comumente detectado (MELO, 2007; MONTES et al. 2013; VAKNIN et al. 2011). Os ácidos mirístico e araquídico encontrados neste trabalho também foram registrados por outros autores. (LEMÕES et al. 2011; OLIVEIRA et al. 2009). Por outro lado, há registros da presença dos ácidos elaídico e láurico, não detectados neste estudo. O restante dos ácidos detectados no presente trabalho não foram relatados em outros estudos de composição de óleo de pinhão-manso. O perfil composicional da espécie mostrou-se predominantemente insaturado.

As cadeias saturadas e insaturadas dos óleos irão determinar as diferenças entre as propriedades químicas e físicas dos mesmos, tais como: ponto de fusão, viscosidade, solubilidade, reatividade química e estabilidade térmica e oxidativa (LÔBO e FERREIRA, 2009).

Os óleos vegetais compostos por ácidos graxos que apresentam polinsaturações são mais propensos a processos oxidativos, principalmente aqueles com proporções variáveis dos ácidos oléico (C18:1), linoléico (C18:2) e linolênico (C18:3) (KNOTHE, 2007).

Os biodieseis produzidos por esses óleos irão apresentar também algumas propriedades peculiares originadas destes. Portanto, há necessidade da caracterização dos mesmos, pois cada biodiesel terá a sua característica própria quanto à suas propriedades físico-químicas, decorrentes dessas cadeias (GREGÓRIO e ANDRADE 2004).

#### **4. CONCLUSÕES**

Os estudos realizados demonstraram a possibilidade do emprego da espectroscopia no infravermelho próximo em conjunto com ferramentas



quimiométricas para a determinação do teor de óleo. O método demonstrou ser rápido e eficiente para análises que demandariam muito tempo e custo elevado, além da vantagem indispensável que é a não-destruição das sementes, para que as mesmas possam ser utilizadas dentro do programa de melhoramento genético de pinhão-manso.

O método de referência utilizado apresentou resultados extremamente satisfatórios, podendo facilmente ser utilizado para esta finalidade. A curva de calibração desenvolvida necessitará da incorporação de novos dados para melhorar ainda mais sua amplitude e robustez.

O perfil cromatográfico do óleo de pinhão-manso foi determinado com sucesso, detectando os ácidos graxos já apresentados em outros estudos e também alguns ácidos que até então não encontram-se relatados na literatura para a espécie em questão.

## 5. REFERÊNCIAS

BARROS, T. F. S.; MEDEIROS, E. P.; ALMEIDA, P. B. A.; ARRIEL, N. H. C.; QUEIROZ, M. F.; FERNANDES, P.D. Aplicação da espectroscopia no infravermelho próximo e análise de componentes principais para identificação de óleos vegetais em espécies de *Jatropha*. In: ANAIS DO CONGRESSO BRASILEIRO DE MAMONA, 5., **Anais...** Campina Grande, p. 418, 2012.

DEGANI, A. L. G.; CASS, Q. B.; VIEIRA, P. C. Cromatografia: um breve ensaio. **Química Nova na Escola**. n. 7, p. 21-25, 1998.

FRANCO, C. M. **Determinação de hidrocarbonetos majoritários presentes no gás natural utilizando espectroscopia no infravermelho próximo e calibração multivariada**. 2008. 128f. Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Brasil, 2008.

FERREIRA, M. M. C.; ANTUNES, A. M.; MELGO, M. S.; VOLPE, P. L. O. Quimiometria I: Calibração multivariada, um tutorial. **Química Nova**, v. 22, n. 5, p. 724-731, 1999.

GONZAGA, F. B. **Desenvolvimento de um Espectrômetro de Emissão para a Região no Infravermelho Próximo**. Campinas, 2006. 117p. Tese (Doutorado em Química) - Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas.

GREGÓRIO, B. M.; ANDRADE, E. C. B. Influência do aquecimento sobre as propriedades físico-químicas de óleos comestíveis. **Higiene Alimentar**. v. 124, p.78-84, 2004.

GRUNVALD, A. K.; LEITE, R. S.; TERRA, I. M.; CARVALHO, C. G. P.; MANDARINO, J. M. G.; ANDRADE, C. A. B.; OLIVEIRA, A. C. B.; RAMOS, N. P.; AMABILE, R. F.; GODINHO, V. P. C.; CARVALHO, H. W. L.; OLIVEIRA, I. R.; AZEVEDO, N. A.; GONÇALVES, S. L. Curva de calibração para predição do teor de óleo pela análise do espectrômetro de infravermelho próximo (NIR) em ensaios de competição de cultivares de girassol no Brasil. In: REUNIÃO NACIONAL DE PESQUISA DO GIRASSOL, 18.; SIMPÓSIO NACIONAL SOBRE A CULTURA DO GIRASSOL, 6., 2009, Pelotas. **Anais...** Pelotas: Embrapa Clima Temperado, 2009. p. 51-58.

HEIN, P. R. G.; LIMA, J. T.; CHAIX, G. Otimização de calibrações baseadas em espectroscopia no infravermelho próximo para estimativas de propriedades da madeira de *Eucalyptus*. **Floresta**, Curitiba, v. 40, n. 3, p.615-624, 2010.

KNOTHE, G. Some aspects of biodiesel oxidative stability. **Fuel Processing Technology**, v. 88. p. 669-677, 2007.

LEMÕES, J. S.; POTES, M. L.; OLIVEIRA, R. J. P.; LEMÕES, L. S.; SILVA, S. D. A. Determinação do teor de óleo e perfil graxo de acessos de pinhão-mansão da Embrapa Clima Temperado. In: II Congresso Brasileiro de Pesquisas de Pinhão-Mansão, **Anais...** Brasília, Brasil, 2011.

LÔBO, I. P.; FERREIRA, S. L. C. Biodiesel: parâmetros de qualidade e métodos analíticos. **Química Nova**, v. 32, n. 6, p. 1596-1608, 2009.

MELO, J. C. **Otimização da produção de biodiesel**. 2007, 95f. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Pernambuco, Brasil, 2007.

MONTES, J. M.; TECHNOW, F.; BOHLINGER, B.; BECKER, K. Grain quality determination by means of near infrared spectroscopy in *Jatropha curcas* L. **Industrial Crops and Products** v. 43, p. 301-395, 2013.

OLIVEIRA, J. S.; LEITE, P. M.; SOUZA, L. B.; MELLO, V. M.; SILVA, E. C.; RUBIM, J. C.; MENEGHETTI, S. M. P.; SUAREZ, P. A. Z.; Characteristics and composition of *Jatropha gossypifolia* and *Jatropha curcas* L. oils and application for biodiesel production. **Biomass and Bioenergy**, v. 33, p. 449-453, 2009.

PEREIRA, C. S. S. **Avaliação de diferentes tecnologias na extração de óleo do pinhão-mansão (*Jatropha curcas* L.)** 2009, 88f. Dissertação de Mestrado - Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Brasil, 2009.

POJIC, M.; MASTILOVIC, J.; PALIC, D.; PESTORIC, M. The development of near infrared spectroscopy (NIRS) calibration for prediction of ash content in legumes on the basis of two different reference methods. **Food Chemistry**, v. 123, p. 800-805, 2010.

RASPE, D. T.; GARCIA, V. A. S.; SEIXAS, F. A. V.; SILVA, C. Determinação de ácidos graxos livres em óleos vegetais por FT-NIR e calibração multivariada. **Revista Ciências Exatas e Naturais**. v. 13, n. 1, p. 113-123, 2011.

SOUSA, G. R. M. **Aplicação da espectroscopia NIR para análise exploratória de plumas e tecidos de algodão colorido**. 2013, 56f. Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual da Paraíba, Brasil, 2013.

TEIXEIRA, J. P. F. Teor e composição do óleo de sementes de *Jatropha* spp. **Bragantia**, Campinas, 1987.

VAKNIN, Y.; GHANIM, M.; SAMRA, S.; DVASH, L.; HENDELSMAN, E.; EISIKOWITCH D.; SAMOCHA Y. Predicting *Jatropha curcas* seed-oil content, oil composition and protein content using near-infrared spectroscopy—A quick and non-destructive method. **Industrial Crops and Products**, v. 34, p. 1029-1034, 2011.

VERAS, G.; GOMES, A. A.; SILVA, A. C.; BRITO, A. L. B.; ALMEIDA, P. B. A.; MEDEIROS, E.P. Classification of biodiesel using NIR spectrometry and multivariate techniques. **Talanta**, v. 83, p. 565-568, 2010.

### **CAPÍTULO 3 – ABORDAGEM MULTIVARIADA NA SELEÇÃO DE ACESSOS PROMISSORES DE PINHÃO-MANSO PARA O MELHORAMENTO GENÉTICO.**

**RESUMO** – Objetivou-se com o presente estudo a utilização de análises multivariadas para a seleção de acessos de pinhão-manso promissores por meio de caracteres agronômicos de interesse, bem como a identificação dos principais caracteres, que influenciaram no processo de seleção. Para tanto, foram analisados 56 acessos de pinhão-manso para os seguintes caracteres quantitativos: teor de óleo, diâmetro de caule, altura da planta, comprimento de semente e largura de semente, sendo os dados submetidos a análise de componentes principais e análise de agrupamento pelo método hierárquico utilizando distância Euclidiana e ligação entre os grupos pelo método de Ward. Na análise de componentes principais (CP), três componentes explicaram 74,1% da variância contida nas variáveis originais. O CP1 reteve 28,39% da variância, sendo caracterizado pelo teor de óleo e diâmetro de caule. O CP2 reteve 24,55% da variância, explicada pela variável comprimento de semente e, 21,17% da variância apresentou-se no CP3, caracterizado pelo diâmetro de caule. Considerando os três componentes principais, foi possível discriminar 12 acessos promissores para programas de melhoramento genético. O dendrograma obtido pela análise de agrupamento apresentou dez grupos, influenciados por todas as variáveis analisadas: teor de óleo, diâmetro de caule, altura, largura e comprimento da semente, onde oito dos 12 acessos discriminados pela PCA encontraram-se em dois grupos próximos, evidenciando certo grau de similaridade entre os mesmos.

**Palavras-chave:** *Jatropha curcas*, análise de agrupamento, análise de componentes principais.

## 1. INTRODUÇÃO

A caracterização de acessos em coleções de programas de melhoramento pode ser caracterizada por diversos tipos de abordagens, desde as marcas moleculares até os caracteres fenotípicos. Com relação aos caracteres fenotípicos, para a cultura do pinhão manso, um dos principais é o teor de óleo. No entanto, o estudo de inter-relações entre os caracteres fenotípicos pode servir para direcionar o processo de seleção, principalmente visando seleção indireta, ou com base em múltiplas características. Além disso, o conhecimento de outras características agronômicas pode ainda complementar a caracterização de acessos, visando futuros cruzamentos para programas de melhoramento genético.

Avaliar as características agronômicas do pinhão-manso e analisar todos os parâmetros ao mesmo tempo em função das informações coletadas se torna interessante quando o objetivo é selecionar acessos promissores, uma vez que muitos fatores estão relacionados de maneira que seus diferentes efeitos são melhor interpretados se estudados em conjunto. Neste sentido, os métodos multivariados têm oferecido contribuições efetivas na identificação de genótipos para serem utilizados em programas de melhoramento genético de diversas culturas (SANTOS et al., 2000; BENIN et al., 2003)

Dentre as técnicas de análise multivariada, a análise de componentes principais (PCA) constitui-se em importante ferramenta, onde uma das finalidades é determinar quais variáveis possuem maior peso na combinação linear dos primeiros componentes principais, sendo as mais importantes do ponto de vista estatístico (MOITA NETO; MOITA, 1998, VIANNA et al. 2013), além de agrupar aquelas com maior similaridade (VALLADARES, 2008).

A análise de componentes principais tem diversas aplicações, como o estudo de divergência genética entre genótipos, por permitir a identificação e seleção dos mais promissores para cultivo e melhoramento, além de possibilitar a avaliação da importância do caráter sobre a variação total disponível entre os genótipos avaliados (MOREIRA et al., 2009). Também é empregada nos estudos de adaptabilidade e estabilidade, nos quais é possível identificar genótipos com potencial para cultivo em condições específicas de ambientes favoráveis (PELUZIO et al., 2008).

A análise de agrupamento, por sua vez, permite classificar indivíduos em grupos de forma a maximizar sua homogeneidade dentro dos grupos e discriminar a heterogeneidade entre os grupos. O método hierárquico interliga as amostras por suas associações, produzindo um dendrograma onde as amostras semelhantes, são agrupadas entre si (MOITA NETO; MOITA, 1998). Por essa razão, essa análise tem sido utilizada de forma eficiente para seleção de genótipos, demonstrando ser complementar à análise de componentes principais (PITTA et al., 2010).

Diante do exposto, o objetivo com este estudo foi selecionar acessos promissores de pinhão-manso avaliados para caracteres agronômicos de interesse, por meio de análises multivariadas, bem como a identificação dos principais caracteres que influenciaram no processo de seleção.

## **2. MATERIAL E MÉTODOS**

### **2.1. Determinação dos caracteres agronômicos**

Além do teor de óleo, foram determinados quatro caracteres agronômicos, tendo como critério, descritores utilizados para mamona (*Ricinus communis* L.). Foram utilizadas as plantas de 56 genótipos pertencentes ao banco de germoplasma da Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias de Jaboticabal -UNESP/FCAVJ, Jaboticabal, SP, instalado na área experimental do Departamento de Produção Vegetal. Para cada caráter agronômico, foram calculadas as médias dos resultados, para cada genótipo. Os caracteres agronômicos avaliados foram:

- ALT - altura de planta (cm): medida tomada desde o colo da planta até o ápice, sendo efetuada para todas as plantas do banco de germoplasma, sendo realizada a média para cada acesso.
- DC - diâmetro do caule (cm): as medidas de diâmetro do caule foram realizadas com auxílio de paquímetro digital. O diâmetro foi tomado a aproximadamente 10 cm acima do colo da planta, ou seja, 10 cm acima do solo. Posteriormente, foi calculada a média para cada acesso.

- CS - comprimento de sementes (cm): as medições de comprimento de sementes também foram realizadas com paquímetro digital. Foram utilizadas dez sementes de cada planta, sendo calculada a média para cada planta e, depois, para o acesso.
- LS - largura de sementes (cm): foi utilizado paquímetro digital para as avaliações. Foram utilizadas dez sementes de cada planta, calculada a média para cada planta e, depois, para o acesso.
- TO - teor de óleo (%): o teor de óleo foi obtido por gravimetria, através do método do extrato-etéreo, utilizando aparelho da marca ANKOM, modelo XT15, para cada planta de cada acesso e, posteriormente, foi calculada a média para acesso.

## **2.2. Análises estatísticas dos dados**

Para a análise dos dados agronômicos, foram realizadas análise de componentes principais e análise de agrupamento pelo método hierárquico de Ward, ambas pelo software Statistica, versão 10 (STATSOFT, 2010).

Os dados foram padronizados resultando em média nula e variância unitária para todas as variáveis.

### **2.2.1. Cálculo dos componentes principais**

No processamento da análise de componentes principais, os autovalores foram extraídos a partir da matriz de covariância que geraram os autovetores denominados de componentes principais, que são determinados a partir da equação característica da matriz (FERRAUDO, 2010).

$AX-\lambda X=0$ , onde:

A é a matriz de coeficientes  $A_{ij}$  (matriz de covariâncias);

X é um vetor desconhecido formado por cada  $X_i$ ,

$\lambda$  constante (autovalor).

Substituindo cada  $\lambda$  (autovalor) no sistema de equações simultâneas são obtidos os autovetores. Os coeficientes da equação foram normalizados para a obtenção de solução única, isto é, para os autovetores serem unitários e ortogonais entre si.

### 2.2.1.1. Cálculo da variância contida em cada componente principal

A proporção da variância total contida em cada componente é obtida através da seguinte expressão:

$$CP_h = \frac{\lambda_h}{\text{Traço}(C)} \times 100$$

Onde:

C é a matriz de covariâncias dos dados originais padronizados.

$\lambda_h$  a h-ésima raiz característica (autovalor) da matriz C.

$$\text{Traço}(C) = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_h$$

Foram considerados os autovalores superiores à unidade, pois estes preservam uma quantidade relevante de informação original (KAISER, 1958).

### 2.2.1.2. Correlações das características com os componentes principais

A correlação das características (variáveis) com os componentes principais é obtida através da fórmula:

$$r_{xj}(CP_h) = \frac{a_{jh} \sqrt{\lambda_h}}{s_j}$$

Sendo:



$S_j$ = desvio padrão da variável  $j$ ;

$A_{jh}$ = coeficiente da variável  $j$  no  $h$ -ésimo componente principal;

$\Lambda_h$ =  $h$ -[ésima raiz característica (autovalor) da matriz de covariância.

### 2.2.2. Análise de agrupamento

A organização dos genótipos em grupos com padrões semelhantes foi possível por meio da análise de agrupamento pelo método hierárquico. A semelhança entre os genótipos foi medida pela distância Euclidiana e a ligação entre os grupos foi feita pelo método de Ward (HAIR et al., 2005).

## 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 3.1. Análise de componentes principais

Os três primeiros componentes principais explicaram 74,11% da variância contida nas cinco variáveis originais.

O primeiro componente principal (CP1) reteve 28,39% da variância original. Conforme observado na Tabela 1, as principais variáveis que explicaram essa retenção da variância foram: TO e DC com valores de correlações com os componentes principais de 0,880 e 0,603, respectivamente. Foram consideradas importantes apenas as correlações acima de 0,6.

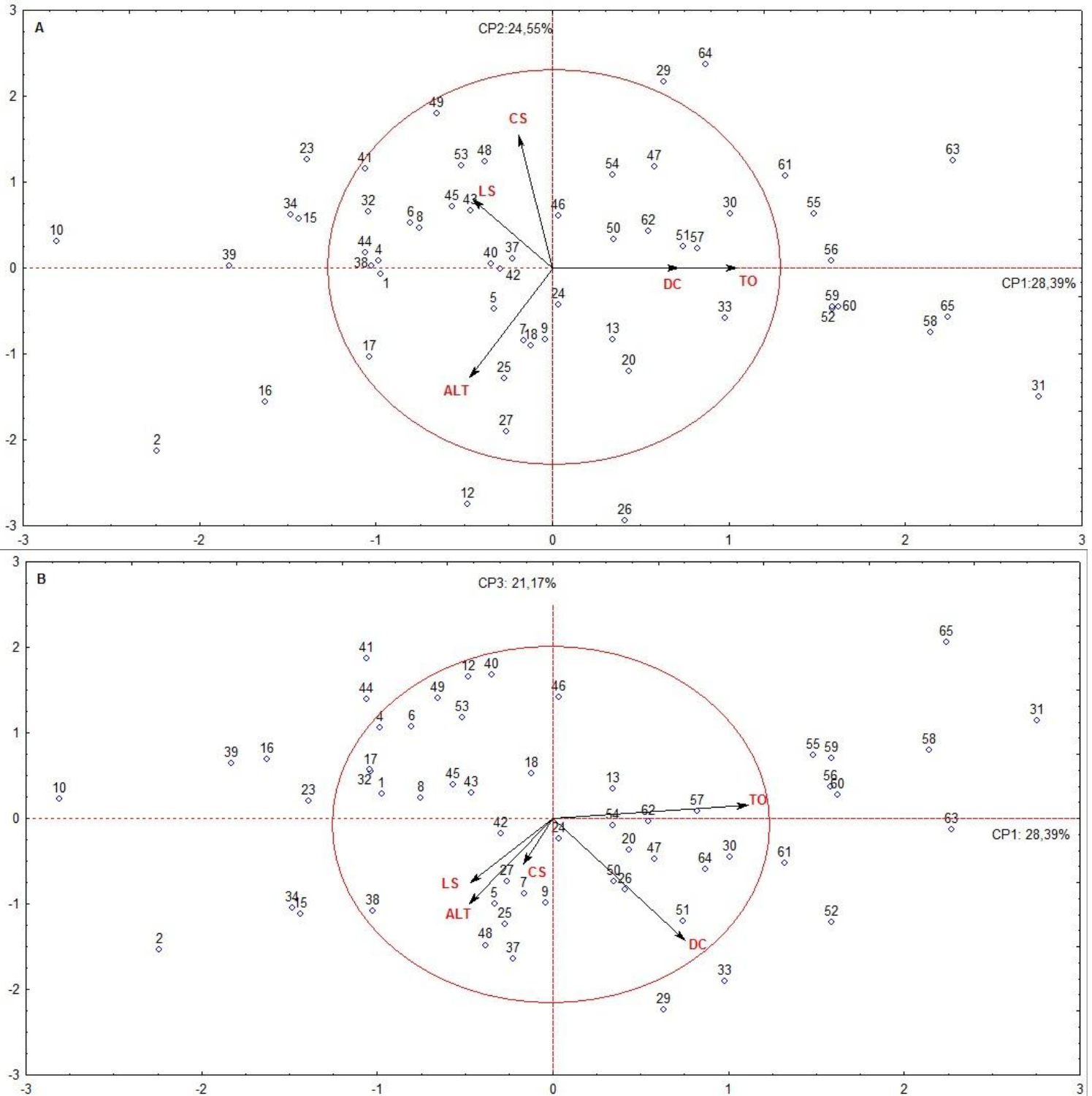
O segundo componente principal (CP2) reteve 24,55% da variância, explicada pela variável CS, com correlação de 0,788. A variável DC com correlação de -0,728, explicou a retenção de 21,17% do terceiro componente principal (CP3).

**Tabela 1.** Correlação entre as variáveis e os componentes principais (CP) dos genótipos de pinhão-manso para os caracteres agrônômicos: teor de

óleo (TO); diâmetro do caule (DC); altura de planta (ALT); comprimento da semente (CS) e largura da semente (LS). Jaboticabal, SP, 2014

	<b>CP1</b>	<b>CP2</b>	<b>CP3</b>
<b>TO (%)</b>	0,880	-0,011	0,071
<b>DC (cm)</b>	0,603	-0,005	-0,728
<b>ALT (cm)</b>	-0,377	-0,672	-0,547
<b>CS (cm)</b>	-0,130	0,788	-0,277
<b>LS (cm)</b>	-0,351	0,393	-0,385

O plano bidimensional formado pelos componentes CP1 (28,39%) e CP2 (24,55%) reteve no total 52,94% da variância original (Figura 1A) e ficou caracterizado pelas variáveis TO, DC e CS, sendo possível discriminar os genótipos 29, 31, 52, 55, 56, 58, 59, 60, 61, 63, 64 e 65 para tais caracteres. O plano bidimensional formado pelos componentes CP1 e CP3 (21,17%) reteve 45,72% da variância remanescente (Figura 1B), sendo caracterizado pelas variáveis TO e DC, discriminando os mesmos genótipos do gráfico CP1xCP2, com exceção do genótipo 64 e adicionando o genótipo 33. As médias dos genótipos selecionados pela PCA encontram-se listadas na Tabela 2.



**Figura 1.** Gráfico *biplot* com dispersão dos 56 genótipos de pinhão-mansó em função dos componentes principais: CP1xCP2 (A); CP1xCP3 (B) e projeção dos vetores das variáveis: teor de óleo (TO), diâmetro do caule (DC), altura de planta (ALT), comprimento da semente (CS) e largura da semente (LS).

**Tabela 2.** Médias dos genótipos de pinhão-manso selecionados através da análise de componentes principais para os caracteres: teor de óleo (TO), diâmetro do caule (DC) e comprimento da semente (CS). Jaboticabal – SP, 2014

<b>Genótipo</b>	<b>TO</b>	<b>DC</b>	<b>CS</b>
29	43,35	5,96	1,93
31	46,82	5,43	1,79
33	42,77	6,10	1,82
52	43,29	6,08	1,83
55	43,31	5,46	1,83
56	42,56	5,68	1,84
58	44,23	5,64	1,77
59	42,35	5,62	1,80
60	43,34	5,76	1,70
61	42,57	5,84	1,88
63	43,67	6,04	1,86
64	40,18	5,96	1,92
65	46,52	5,06	1,72

Em estudo envolvendo 15 acessos de pinhão-manso e 15 caracteres morfológicos relacionados à reprodução da planta, Nietzsche et al. (2013), também realizaram a análise de componentes principais. Neste estudo, os três primeiros componentes explicaram 73,5% da variância total, sendo CP1: as variáveis peso de semente seca e peso de 100 sementes explicaram 37,2% da variância contida no primeiro componente principal; CP2: número de flores por inflorescência e flores masculinas por inflorescência retiveram 19,4% da variância, sendo que 16,9% da variância contida em CP3 foi explicada pela variável frutificação. As variáveis peso de semente seca, peso de 100 sementes, número de flores por inflorescência, flores masculinas por inflorescência e frutificação foram usadas para distinguir os acessos, dos quais dois foram selecionados para programas de melhoramento genético.

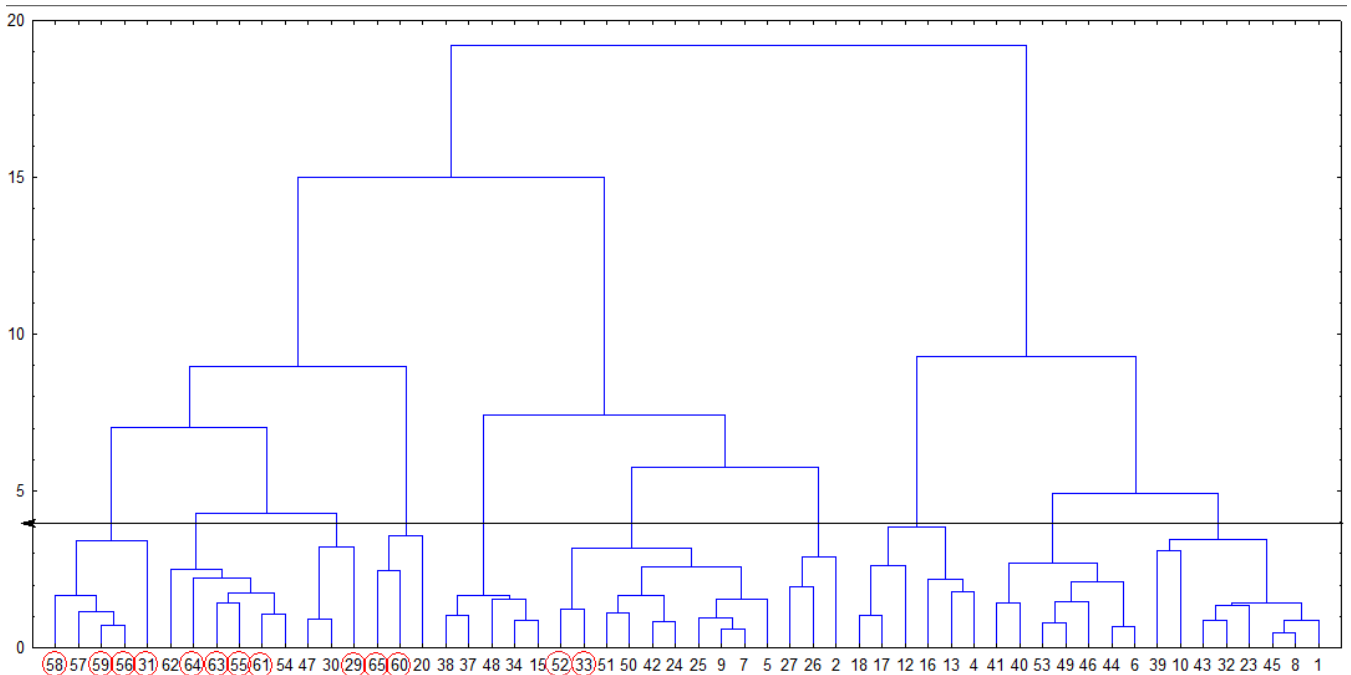
Shabanimofrad et al. (2011), utilizaram 59 acessos de pinhão-manso, os quais foram avaliados para 6 caracteres agrônômicos, dentre eles: comprimento de semente, largura de semente e teor de óleo, também avaliados no presente trabalho. A análise de componentes principais indicou que as variáveis comprimento de semente, largura de semente, comprimento de fruto e largura de fruto explicaram

a variância contida em CP1 e as variáveis peso de 100 sementes e teor de óleo explicaram a variância contida em CP2. Conjuntamente, CP1 e CP2 explicaram 72,1% da variância contida nas seis variáveis originais.

Informações fenotípicas são imprescindíveis para a caracterização dos acessos e para seleção de genótipos superiores para o melhoramento genético da espécie (NIETSCHE et al., 2013).

### 3.2. Análise de agrupamento

A análise de agrupamento pelo método de Ward gerou o dendrograma que está representado na Figura 2. Os acessos discriminados na análise de componentes principais encontram-se circulosados em vermelho.



**Figura 2.** Dendrograma da análise de agrupamento hierárquico utilizando a distância Euclidiana e a ligação entre os grupos pelo método de Ward, para os caracteres agrônômicos: teor de óleo (TO); diâmetro do caule (DC); comprimento de semente (CS); altura da planta (ALT) e largura de semente (LS). Jaboticabal – SP, 2014

No dendrograma obtido nota-se a formação de 10 grupos de acordo com o corte traçado. Os dois primeiros grupos englobam 8 dos 13 acessos selecionados pela análise de componentes principais, indicando certa similaridade entre esses acessos.

É importante salientar que a análise de agrupamento permite identificar os genótipos pertencentes aos grupos mais distantes, podendo ser utilizados para hibridização, visando à exploração da variabilidade genética da espécie (NIETSCHE et al., 2013).

A menor distância entre os pares de acessos ocorreu entre o acesso 8 e 45, os quais possuem exatamente os mesmos valores para CS e LS. Os genótipos 56 e 59, que também apresentaram uma distância pequena entre si, obtiveram exatamente o mesmo valor de altura de planta, além de todos os outros caracteres analisados apresentarem valores muito próximos. Analisando o dendrograma, nota-se que todos os cinco caracteres analisados influenciaram na forma que os genótipos foram agrupados.

No estudo de Nietzsche et al. 2013, foi feita análise de agrupamento pelo método não-hierárquico do Vizinho mais próximo, utilizando-se distância Euclidiana. Os 15 acessos estudados foram divididos em cinco grupos, notando-se separação por procedência.

Na pesquisa realizada por Shabanimofrad et al. 2011, foi realizada análise de agrupamento pelo método UPGMA, onde os 59 acessos foram separados em três grupos. O primeiro agrupou 35 acessos, similares pelas variáveis de largura e comprimento de semente, largura e comprimento de fruto, e peso de 100 sementes. O segundo grupo reuniu 23 acessos, similares pelo teor de óleo. E o terceiro grupo contou apenas com um acesso, que apresentou as menores médias para todas as variáveis analisadas.

#### **4. CONCLUSÕES**

As análises multivariadas permitiram a indicação de acessos promissores para composição de um programa de melhoramento genético, bem como

identificaram aqueles mais e menos similares, podendo direcionar a seleção de acessos divergentes visando hibridização.

Os caracteres que permitiram discriminar os acessos foram: teor de óleo, diâmetro de caule e comprimento de semente.

## 5. REFERÊNCIAS

BENIN, G.; CARVALHO, F. I. F. ; OLIVEIRA, A. C.; MARCHIORO, V. S.; LORENCETTI, C.; KUREK, A. J.; SILVA, J. A. G.; CRUZ, P. J.; HARTWIG, I. SCHMIDT, D. A. M. Comparações entre medidas de dissimilaridade e estatísticas multivariadas como critérios no direcionamento de hibridações em aveia. **Ciência Rural**, Santa Maria, v.33, n.4, p.657-662, 2003.

FERRAUDO, A. S. Técnicas de análise multivariada – uma introdução. Apostila, 2010. 72p.

HAIR, J.F.; ANDERSON, R.E.; TATHAM, R.L.; BLACK, W. **Análise Multivariada de dados**. Porto Alegre: Bookman. 2005.

KAISER, H.F. The varimax criterion for analytic rotation in factor analysis. **Psychometrika**, v.23, p. 187-200, 1958.

MOITA NETO, J. M.; MOITA, G. C. Uma introdução à análise exploratória de dados multivariados. **Química Nova**, São Paulo, v.21, n.4, 1998.

MOREIRA, R.M.P.; FERREIRA, J.M.; TAKAHASHI, L.S.A.; VASCONCELOS, M.E.C.; GEUS, L.C.; BOTTI, LEANDRO. Potencial agrônômico e divergência genética entre genótipos de feijão-vagem de crescimento determinado. **Revista Semina: Ciências Agrárias**, Londrina, v. 30, p. 1051-1060, 2009.

NIETSCHE, S.; VENDRAME, W.A.; CRANE, J. H.; PEREIRA, C. T.; COSTA, A.; REIS, S.T. Variability in reproductive traits of *Jatropha curcas* L. accessions during early developmental stages under warm subtropical conditions. **CGB Bioenergy**, p. 1-13, 2013.

PELÚZIO, J.M.; FIDELIS, R. R.; GIONGO, P. R.; SILVA, J. C.; CAPPELLARI, D.; BARROS, H. B. Análise de regressão e componentes principais para estudo da adaptabilidade e estabilidade em soja. **Scientia Agraria**, Curitiba, v.9, p.455-462, 2008.

PITTA, R. M.; JUNIOR, A. L. B.; JESUS, F. G.; TAGLIARI, S. R. A. Seleção de genótipos resistentes de amendoim a *Anticarsia gemmatilis* Hubner (Lepidoptera: Noctuidae) com base em análises multivariadas. **Neotropical Entomology**, Londrina, v.39, p.260-265, 2010.

SANTOS, R.C.; MOREIRA, J. A. N.; FARIAS, R. H.; DUARTE, J. M.. Classificação de genótipos de amendoim baseada nos descritores agromorfológicos e isoenzimáticos. **Ciência Rural**, Santa Maria, v.30, n.1, p.55-59, 2000.

SHABANIMOFRAD, M.; YUSOP, M. R.; SAAD, M. S.; WAHAB, P. E. M.; BIABANIKHANEHKAHDANI, A.; LATIF, M. A. Diversity of physic nut (*Jatropha curcas*) in Malaysia: application of DIVA-geographic information system and cluster analysis. **Australian Journal of Crop Science**, v. 5, n.4, p. 361-368, 2011.

STATSOFT, Inc. (2010). **STATISTICA**, versão 10. [www.statsoft.com](http://www.statsoft.com).

VALLADARES, G. S.; GOMES, E. G.; MELLO, C. C. B. S.; PEREIRA, M. G.; ANJOS, H. C.; EBELING A. G.; BENITES, V. M. Análise dos componentes principais e métodos multicritério ordinais no estudo de organossolos e solos afins. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, Viçosa, v. 32, n. 1, p. 285-296, 2008.

VIANNA, V. F.; UNÊDA-TREVISOLI, S. H.; DESIDÉRIO, J. A.; SANTIAGO, S.; CHARNAI, K.; JUNIOR, J. A. F.; FERRAUDO, A. S.; DI MAURO, A. O. The multivariate approach and influence of characters in selecting superior soybean genotypes. **African Journal of Agricultural Research**, v. 8, n. 30, p. 4162-4169, 2013.



## **CAPÍTULO 4 - CONSIDERAÇÕES FINAIS**

A curva de calibração construída, com a devida adição de novos dados, poderá ser utilizada para predição de teor de óleo, não havendo mais a necessidade de destruição das sementes para tais análises, economizando tempo e garantindo a manutenção das sementes para futuros estudos genéticos dentro do programa de melhoramento genético do pinhão manso.

Os acessos discriminados pelas análises multivariadas poderão ser selecionados como promissores, bem como poderão ser realizadas hibridizações entre os acessos mais divergentes. Futuras ações podem ser programadas visando a ampliação dos caracteres agronômicos avaliados na totalidade dos acessos do banco de germoplasma, visando a caracterização fenotípica completa do mesmo.