

CLASSIFICAÇÃO DE CAFÉS USANDO A ESPECTROMETRIA UV-VIS E O ALGORITMO DAS PROJEÇÕES SUCESSIVAS

Márcio J. C. Pontes¹(PG), Urijatan T. C. P. Souto¹(PG), Edvan C. Silva¹(PQ), Roberto K. H. Galvão²(PQ), Mário C. U. Araújo¹(PQ), Fátima A. C. Sanches¹(PG), Francisco A. C. S. Cunha¹(IC), Maria. S. R. Oliveira³(PG).

[*marciocoelho@yahoo.com.br](mailto:marciocoelho@yahoo.com.br)

¹Departamento de Química – Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa – PB.

²Divisão de Engenharia Eletrônica – Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos – SP.

³Departamento de Química Fundamental – Universidade Federal de Pernambuco, Recife – PE.

Palavras Chave: Classificação de cafés, Espectrometria UV-VIS, SPA-LDA.

Introdução

O consumo de cafeína pode provocar diversos problemas de saúde, tais como arritmia, hiperglicemia, vômitos, convulsões, redução da qualidade do sono, entre outros¹. Dessa forma, a opção por cafés descafeinados pode ser apropriada, principalmente para pessoas que apresentam alta sensibilidade à cafeína. Um outro aspecto que merece destaque no que diz respeito à qualidade do café é o seu estado de conservação, uma vez que elevações na temperatura e na pressão parcial de oxigênio podem acelerar a degradação do café, causando uma redução substancial de sua qualidade. A classificação ou autenticação de amostras de cafés tem sido realizada empregando técnicas instrumentais, tais como HPLC, GCMS, ICP OES, RMN, entre outras. Contudo, a grande maioria dessas técnicas requer reagentes perigosos e/ou equipamentos caros com elevado custo de operação e manutenção. Neste trabalho, o uso da espectrometria UV-VIS e a Análise Discriminante Linear (LDA) com seleção de variáveis pelo Algoritmo das Projeções Sucessivas (SPA)² é avaliado para classificação de amostras de café com respeito ao tipo (cafeinado/descafeinado) e ao estado de conservação (vencido e não vencido). O SPA-LDA é comparado com modelos SIMCA, construídos em toda a região espectral, em função do número de erros para o conjunto de teste.

Experimental

Cento e setenta e cinco amostras de café (descafeinado não vencido: 31; cafeinado não vencido: 54; descafeinado vencido: 22 e cafeinado vencido: 68) foram submetidas à extração aquosa a uma temperatura entre 90 e 98°C. Os extratos foram diluídos com água destilada na proporção de 1:20 (v/v) e, em seguida, os espectros UV-VIS foram registrados na região de 225-353 nm, com 1 nm de resolução.

Resultados e Discussão

Modelos SIMCA construídos com base em toda a região espectral apresentaram um bom desempenho de classificação com respeito ao tipo

do café (descafeinado ou cafeinado). Contudo, para a avaliação do estado de conservação (vencido ou não vencido), um número elevado de erros foi encontrado, principalmente para a classe dos cafeinados.

O SPA-LDA selecionou quinze variáveis, correspondentes aos comprimentos de onda: 225, 226, 227, 229, 231, 235, 244, 259, 271, 274, 280, 293, 324, 339 e 353 nm. A **Tabela 1** apresenta o resumo dos erros de classificação dos modelos SIMCA e SPA-LDA para o conjunto de teste.

Tabela 1. Erros de classificação dos modelos SIMCA (com 95% de confiança) e SPA-LDA para as amostras do conjunto de teste.

	SIMCA	SPA-LDA
Tipo I	1	0
Tipo II	26	0
Total	27	0

Com o modelo SIMCA, apenas 1 erro do Tipo I (amostra não classificada em sua classe verdadeira) foi encontrado. Porém, 26 erros do Tipo II (amostra classificada em uma classe errada) foram observados aplicando este modelo. O modelo SPA-LDA obtido com os quinze comprimentos de onda classificou corretamente todas as amostras do conjunto de teste (100% de acerto).

Conclusões

A combinação da espectrometria UV-VIS com o SPA-LDA mostrou-se uma alternativa eficiente para a classificação de cafés com respeito ao tipo (descafeinado ou cafeinado) e ao estado de conservação (vencido ou não vencido). Como vantagens, esta metodologia não utiliza reagentes, possibilita uma rápida obtenção dos resultados com custo relativamente baixo por análise.

Agradecimentos

CAPES (PROCAD 0081/05-1) e CNPq.

¹ Kerrigan, S. e Lindsey, T. *Forensic Sci. Int.* **2005**, 153, 67.

² Pontes, M. J. C. et al, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2005**, 78, 11.