

Determinação simultânea de carboidratos totais e calorias em café cru empregando DRIFTS/PLS

Isabel da Cruz Brenol¹ (IC), Marco Flôres Ferrão^{*1} (PQ), Marcelo A. Morgano^{2,4} (PQ)

Neura Bragagnolo³ (PQ) e Márcia M.C. Ferreira⁴ (PQ)

¹UNISC – Santa Cruz do Sul - RS, ²ITAL –Campinas – SP,

³FEA-UNICAMP – Campinas – SP e ⁴IQ-UNICAMP – Campinas - SP

e-mail: ferrao@dquimfis.unisc.br

Palavras Chave: carboidratos totais, calorias, café

Introdução

As análises físico-químicas convencionais para a avaliação da qualidade do café envolvem testes físicos e químicos laboriosos, que dependem de reagentes, equipamentos, mão de obra especializada e maior tempo de execução. A espectros-cópia no infravermelho tem apresentado grandes avanços em diversas aplicações e está se tornando uma técnica alternativa às análises físico-químicas de controle de qualidade de alimentos e produtos de agricultura. Aliando-se a técnica de espectroscopia no infravermelho aos métodos de análise multi-variada de dados, tempo, reagentes e mão-de-obra podem ser poupados. Neste trabalho pretende-se mostrar o emprego da espectroscopia no infra-vermelho associada a métodos multivariados de análise para determinar a quantidade de carboidratos totais e de calorias visando a avaliação da qualidade do café cru.

Resultados e Discussão

Foram obtidos espectros em triplicata de 53 amostras de café cru moído analisadas num espectrofotômetro no infravermelho médio Nicolet acoplado a um acessório de reflexão difusa. Empregando-se o método de regressão por mínimos quadrados parciais (PLS) *Turbo Quant Analyst* da Nicolet e 87 espectros correspondentes a 29 amostras, foram construídos 15 modelos para estimar a quantidade de carboidratos totais e as calorias de diferentes amostras de café cru. Os modelos diferiram entre si em função das regiões modeladas, bem como da aplicação ou não de 1ª e 2ª derivadas, e ainda se os dados foram centrados na média e/ou escalados pela variância ou se foi empregada a correção do espalhamento de luz (MSC). Para avaliar os modelos foram determinados os erros padrões para as amostras de calibração (SEC) e para as amostras de validação (SEV), sendo este último

determinado com base nos espectros das 24 amostras que não foram empregadas na modelagem.

Os resultados dos 3 melhores modelos, com base nos valores de SEV, para estimar cada um dos parâmetros são apresentados nas TABELAS 1 e 2. O melhor modelo para estimar carboidratos totais é o modelo 04 que emprega 7 variáveis latentes (VL) e a correção do espalhamento de luz (MSC) sobre o conjunto de dados, sem aplicação do cálculo de derivadas. O mesmo modelo apresentou o melhor desempenho para estimar as calorias, porém, neste caso foram empregadas 8 variáveis latentes.

Tabela 1. Resultados para os 3 melhores modelos empregados para estimar a quantidade de carboidratos totais de amostras de café cru.

Modelo	VL	R ²	SEC	SEV
01	4	0,462	3,53	5,02
02	4	0,455	3,56	5,05
04	7	0,821	1,59	5,14

Tabela 2. Resultados para os 3 melhores modelos empregados para estimar a quantidade de calorias de amostras de café cru.

Modelo	VL	R ²	SEC	SEV
01	3	0,53	12,6	23,17
02	3	0,475	13,62	21,71
04	8	0,876	4,95	21,6

Conclusões

Este trabalho mostrou ser possível construir modelos de calibração multivariada empregando dados DRIFTS para estimar a quantidade de carboidratos totais e calorias em amostras de café cru. Em função das características das amostras os melhores resultados foram obtidos quando

Sociedade Brasileira de Química – SBQ
empregamos a correção de espalhamento de luz (MSC). Esta técnica é bastante útil pois dispensa o uso de reagentes e a pré-determinação dos teores de gorduras, proteínas, umidade e resíduo mineral.

Agradecimentos

Agradecimentos: Embrapa e UNISC.
