

Reconhecimento de padrões não supervisionado de cafés com diferentes graus de torra e processamentos utilizando cromatogramas obtidos por SPME-GC-FID alinhados pelo algoritmo COW

Juliano Souza Ribeiro* (PG)¹, Reinaldo Francisco Teófilo (PG)¹, Fábio Augusto (PQ)² e Márcia Miguel Castro Ferreira (PQ)¹

1. Lab. Quimiometria Teórica e Aplicada – Instituto de Química - UNICAMP, Campinas - SP

2. Lab. Cromatografia Gasosa - Instituto de Química - UNICAMP, Campinas - SP

e-mail: jribeiro@iqm.unicamp.br ou marcia@iqm.unicamp.br

Palavras Chave: voláteis, café torrado, SPME e alinhamento

Introdução

Devido à grande importância que o aroma representa na qualidade e aceitação da bebida café, seus componentes voláteis vêm sendo objeto de inúmeras pesquisas recentes¹.

Tratamentos quimiométricos aplicados a dados obtidos por estas pesquisas vêm se tornando uma ótima ferramenta no controle de qualidade de alimentos e produtos agrícolas sendo aplicada com sucesso em análises de vinhos, vinagres, chás e sucos^{2,3}.

A técnica analítica utilizada para extração dos voláteis foi a microextração em fase sólida (SPME). Esta técnica combina amostragem e pré-concentração dos analitos num único processo, além de possibilitar a dessorção direta no sistema cromatográfico⁴.

Resultados e Discussão

Condições cromatográficas. temperatura do liner: 220°C; coluna utilizada: HP-5–Crosslinked 5% PH, ME silixan; temperatura inicial do forno: 40°C; rampa de aquecimento: 7°C por minuto até 230°C e 30°C por minuto até 280°C. Tempo total de análise: 28 minutos. A fibra de SPME utilizada foi a Carboxen/PDMS.

Condições experimentais utilizadas. 250 mg de café torrado e 2 mL de solução saturada de cloreto de sódio foram misturados em recipientes de 12 mL fechados hermeticamente. O tempo de pré-equilíbrio utilizado foi de 10 minutos em banho termostático a 40°C. O tempo de equilíbrio ou exposição das fibras também foi de 10 minutos.

Neste trabalho, as seguintes amostras de cafés, com diferentes graus de torrefação e processamentos foram analisadas: descafeinada, 5 amostras (**DSC**); tradicionais, 4 amostras (**T**); e extra-fortes, 3 amostras (**EF**). Todas realizadas em triplicata.

Antes da execução da análise de componentes principais (PCA) os cromatogramas foram alinhados usando o algoritmo “correlation optimized Warping” (COW)⁵. A Figura 1A mostra uma parte do

cromatograma antes e após o alinhamento. Observe a grande necessidade de se realizar o alinhamento antes da aplicação da PCA.

A Figura 1B apresenta os escores das componentes 1 e 2 (96,83 % da variância dos dados) obtidos pela PCA. A separação das amostras em grupos distintos é facilmente observada. As amostras **DSC** apresentam características bem diferentes das amostras **T** e **EF**, devido ao processo e à torra. As amostras **T** formaram um grupo compacto distinto das amostras **EF**. Estes grupos apresentam como principal diferença o grau de torra. As seguintes regiões foram responsáveis pela discriminação das amostras: 2540 a 2865 s e 4475 a 4785 s (**DSC**); 3050 a 3460 s (**T**); 3820 a 4110 s (**EF**).

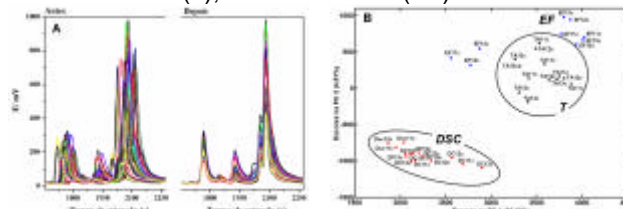


Figura 1. Parte do cromatograma antes e após o alinhamento (A); Representação gráfica dos escores das componentes 1 e 2 (B).

Conclusões

Duas principais conclusões podem ser obtidas: (i) o algoritmo COW mostrou ser uma ferramenta eficiente para o alinhamento de dados cromatográficos; (ii) cromatogramas de compostos voláteis de cafés trazem informações suficientes para distinguir padrões entre diferentes graus de torrefação bem como de processos.

Agradecimentos

CAPES, CNPq e Instituto Agrônomo de Campinas

¹ Yeretian, C., Jordan, A., Lindinger, W., *Inter. J. Mass Spectrom.*, 223-224, 115-139 (2003);

² Reid, L. M., O'Donnell, C. P., Downey, G., *J. Agric. Food Chem.*, 52, 421-427 (2004);

³ Vas, G., Vékey, K., *J. Mass Spectrom.*, 39, 233-254 (2004);

⁴ Akiyama, M., Murakama, K., Otan, N., Iwatsuki, K., Sotoyama, K., Wada, A., Tokuno, K., Iwabuchi, H., Tanaka, K., *J. Agric. Chem.*, 51, 1961-1969 (2003);

⁵ Tomasi, G., Van der Berg, F., Andersson, C., *J. Chemometrics*, 18, 231 (2004);