

## METODOLOGIAS LIMPAS PARA DETERMINAÇÃO DE AÇÚCARES TOTAIS EM CAFÉ CRU EMPREGANDO ALGORITMOS GENÉTICOS

*Marco Flôres Ferrão (PQ)<sup>1</sup>, Luiz Gustavo Neumann (IC)<sup>2</sup>, Pedro Henrique de Almeida Konzen (IC)<sup>3</sup>, João Carlos Furtado (PQ)<sup>4</sup>, Marcelo Antonio Morgano (PQ)<sup>5</sup>, Neura Bragagnolo (PQ)<sup>6</sup> e Márcia Miguel Castro Ferreira (PQ)<sup>7</sup>*

<sup>1</sup>Departamento de Química e Física - Universidade de Santa Cruz do Sul, <sup>2</sup>Curso de Engenharia da Produção - Universidade de Santa Cruz do Sul, <sup>3</sup>Curso de Matemática Computacional - Universidade de Santa Cruz do Sul, <sup>4</sup>Departamento de Informática - Universidade de Santa Cruz do Sul, <sup>5</sup>Instituto de Tecnologia de Alimentos, <sup>6</sup>Faculdade de Engenharia de Alimentos - UNICAMP, <sup>7</sup>Instituto de Química – UNICAMP – Campinas - SP

*Palavras-chave: DRIFTS, café, quimiometria, algoritmos genéticos.*

Métodos de determinação não destrutivos e não geradores de resíduos nocivos ao ambiente vem sendo cada vez mais estudados, principalmente empregando informações provenientes de técnicas espectroscópicas por reflexão. Neste trabalho o teor de açúcares totais de amostras de café cru moído, determinado inicialmente pelo método de Munson-Walker (AOAC), foi modelado empregando os espectros de reflexão no infravermelho próximo (NIRR) juntamente com a técnica de regressão por mínimos quadrados parciais (PLS) e otimização com algoritmos genéticos (AG). Os espectros no infravermelho foram coletados em um espectrofotômetro BOMEM DA-08, sendo empregadas 2 réplicas para cada amostra, com resolução de  $4\text{ cm}^{-1}$  e 16 varreduras. As matrizes para a modelagem contendo os espectros foram construídas com 39 amostras em duplicata, sendo 42 espectros para calibração e 36 para validação compreendidos entre  $4.600\text{-}10.000\text{ cm}^{-1}$ . Modelos de calibração, em ambiente MATLAB, foram obtidos e validados com as amostras de café que não foram utilizadas na construção dos mesmos. Para a otimização dos modelos foi empregada uma rotina do algoritmo genético desenvolvida em ambiente MATLAB. Na execução da rotina do AG foram empregados 50 cromossomos, *crossover* em apenas um ponto do cromossomo, 5% de mutação e 500 iterações. Os melhores modelos apresentaram erro padrão de validação (SEV) de 0,232% e 0,117%, empregando 7 e 11 variáveis latentes, respectivamente, e coeficientes de correlação de 0,964 e 0,996. Embora o modelo não otimizado (com todas as frequências) apresente  $R^2$  igual a 0,998 e SEC de 0,054%, o valor de SEV de 1,080% indica claramente uma tendência ao *overfitting*. Estes resultados revelam que a técnica NIRR/PLS/AG pode ser usada como uma excelente alternativa para a quantificação dos teores de lipídios em alimentos.

**FAPERGS, EMBRAPA, PROGRUPE-UNISC e FUNDAP-UNISC**