

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

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

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