

PREVISÃO DA QUALIDADE DA BEBIDA *ESPRESSO* DE CAFÉ PELO NIR (ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO)

Marino PETRACCO E-mail: marino.petracco@illy.it

illycaffè, Università del Caffè, via Flavia 110, 34147 Trieste, ITALY

Resumo:

O valor do café a ser vendido para o mercado da bebida *espresso*, muito popular na Itália e apreciada também em outros países do mundo – inclusive agora no Brasil – está principalmente na qualidade sensorial dele, tradicionalmente avaliada por prova de xícara. O custo dessa atividade é alto vista a necessidade de uma equipe de degustadores experientes para julgar muitas amostras por dia. Na prática industrial seria útil um método instrumental, rápido e não destrutivo, para rejeitar *a priori* aquelas amostras que a equipe descartaria inevitavelmente.

Desenvolvemos um processo para avaliar a credibilidade das previsões obtidas pela correlação do mérito sensorial de muitas amostras com seus espectros no infravermelho próximo. No prazo de sete anos foram coletados 3438 espectros, entre os quais escolhemos 1753 para construir uma biblioteca. Testamos duas técnicas para fornecer equações de calibração: regressão clássica pelo método dos mínimos quadrados, e regressão local selecionando por cada amostra os espectros vizinhos mais adaptados. Os melhores resultados chegaram da segunda técnica, demonstrando-se bem adequados para uso industrial.

Palavras-chave: espectrometria, estatística, calibração, *espresso*, café.

PREDICTION OF *ESPRESSO* COFFEE QUALITY BY NIR (NEAR INFRARED SPECTROSCOPY)

Abstract:

Espresso coffee value stems mainly from its sensory quality, as traditionally determined by cup-testers' panels. Since this approach is time-consuming and expensive, the number of tested samples per day is often inadequate to meet with industrial needs. An instrumental screening procedure, able to discard *a priori* undesirable samples likely to be rejected by the panel, would be therefore of help if rapid, non destructive, and reliable.

We developed a procedure for checking the reliability of predictions obtained examining a large number of Near Infra Red spectra with the related sensory Merit data. From a total of 3438 raw coffee samples from Brazil, collected over a seven year period, 1753 samples were chosen to build a library. We studied predictions based on global calibrations and by local data base regression, selecting appropriate neighbours to an individual calibration for each sample. Results show that the latter technique performs better than global calibration by partial least squares regression, and is precise enough for industrial purposes.

Key words: spectrometry, statistics, calibration, *espresso*, coffee.

Introdução

Qualidade do café

O café, frequentemente mencionado como a segunda mercadoria mais negociada depois do petróleo, não é necessário para a nutrição mas, apreciado pelo seu gosto agradável, além dos seus efeitos fisiológicos contrários à sonolência e favoráveis à performance. A avaliação da qualidade é importante em ambos estes âmbitos para satisfazer o consumidor com um produto agradável e saudável. Isto vale sobretudo, para o café *espresso* (Illy & Viani, 2005), um modo de degustar a xícara de café que ganha popularidade no mundo inteiro graças ao maior impacto sensorial que exerce sobre o consumidor, quando comparado com outras técnicas de preparo (Petracco, 2001).

Devido à complexidade da estrutura da semente, e ainda mais à do grão após a torrefação, são necessárias análises primárias capazes de examinar famílias de compostos químicos pouco conhecidos. Hoje em dia o enfoque químico na esfera sensorial toma proveito do desenvolvimento de métodos analíticos sempre mais sofisticados, onde as partes por bilhão de aromas voláteis não constituem uma fronteira aos limites de detecção (Vitzthum, 1999).

Análise sensorial

Por quanto possam ser avançadas as técnicas instrumentais, a degustação tradicional permanece a ferramenta derradeira do controle de qualidade. A razão pela qual o café se tornou tão popular, a ponto de ser a segunda bebida mais consumida após a água, é o seu aroma, ou melhor, o seu impacto sobre o conjunto dos nossos sentidos. A avaliação sensorial, antigamente considerada coisa mágica já que “gostos, cores e amores não se discutem”, atualmente ganhou a dignidade de ciência respeitada, com resultados confiáveis (Meilgaard, Civille & Carr, 1999).

Na prática industrial, é necessária uma maneira objetiva de avaliar a qualidade do produto, mas sobretudo, a constância de tal qualidade no tempo e nas variações do processo. A “ferramenta” mais utilizada é uma equipe de provadores, sejam experientes em café, sejam consumidores normais as vezes após um treinamento básico (ICO, 1991).

A razão pela qual se usa mais de uma pessoa é óbvia: o risco de erros por mau-humor, resfriados, ou leves doenças de uma pessoa é minimizado utilizando uma média aritmética. Outra vantagem da equipe é a sinergia conquistada pela discussão transparente das características das amostras entre os provadores: assim, se pode obter maior quantidade de informação graças às sensibilidades pessoais com diferentes limiares de percepção individuais. Infelizmente, este processo possui custos elevados, já que as sessões não podem ser muito longas ou frequentes ao longo do dia, quando depois da primeira dúzia de xícaras a fadiga se torna crítica. O fato acontece particularmente com o *espresso*, onde se encontram muitas gotículas de óleo emulsionadas (Petracco, 1989) que permanecem fixadas na língua por algum tempo. Portanto, a indústria se dedica a utilizar bancos de dados sensoriais como elementos experimentais úteis para a calibração de aparelhos de pré-seleção.

Examens instrumentais

Espectroscopia NIR é um bom exemplo de técnica de identificação rápida e não destrutiva. É baseada na medição da absorção de luzes monocromáticas no infravermelho próximo, cuja energia é dissipada no material examinado, por movimentos moleculares de rotação e vibração, até transformar-se em calor (Murray & Williams, 1987). Os padrões de absorção contêm muita informação implícita sobre a reação molecular sob ação de vários comprimentos de onda. No caso de materiais sólidos opacos, pode ser aplicado de preferência o procedimento conhecido como Reflexão Difusa. Já que a radiação infravermelha pode penetrar alguns milímetros no material, acreditamos que o termo “Transflexão” descreve melhor a técnica aplicada neste trabalho.

A transflexão já foi utilizada no passado para obter previsões múltiplas de várias características químicas, depois de calibrar os aparelhos pelas correlações estatísticas com métodos tradicionais de análise, que consomem tempo excessivamente. Este método secundário foi largamente utilizado para produtos de agricultura (Shenk, 1992) e também para o café (Davrieux et al., 2001; Downey & Boussion, 1996; Guyot, Davrieux & Vincent, 1993), até para dados sensoriais (Feria-Morales, 1991).

Objetivo do trabalho

Neste trabalho, utilizamos dados de transflexão para prever uma nossa variável privada de qualidade: o Mérito, com o alvo de avaliar grandes números de amostras de café ouro em grãos. Isto apenas como análise preliminar à tradicional prova de xícara. De fato, nossa intenção não é absolutamente de substituir por uma máquina os provadores, mas sim de protegê-los através de um “escudo” capaz de arcar com o risco de perder amostras boas (raras em algumas safras) eliminando ao mesmo tempo aquelas amostras ruins que teriam sido rejeitadas pela equipe.

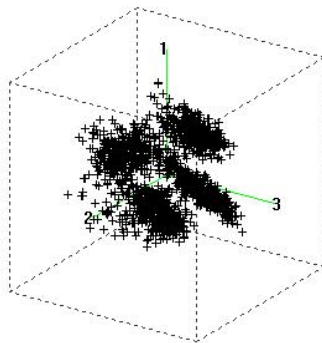
Material e Métodos

Materiais

Alguns milhares de amostras de café ouro comercial de diversas origens foram examinadas no prazo de sete anos num aparelho NIRSystems 6500 analyser (Foss Tecator) equipado com uma célula translacional de apresentação da amostra. Esta célula permite muitas leituras de aproximadamente 100 g de grãos de café cru, o que constitui o tamanho correto para torrar e degustar uma amostra. Logo, cada amostra foi processada com o procedimento *espresso* descrito na literatura (Petracco, 2000) e avaliada pela equipe I no que diz respeito a vários atributos inclusive o Mérito.

Métodos

Espectros, com 1050 *data points* desde 400 a 2498 nm em passos de 2 nm, foram elaborados no computador pelo



programa WinISI II *version* 1.50 (InfraSoft International). Construímos uma biblioteca de produtos com 1753 espectros de cafés brasileiros selecionados a partir de 3438 amostras, conservados depois da eliminação de alguns deles evidentemente estrangeiros e reduzindo a densidade nas áreas mais populosas (vide Fig. 1).

Fig.1 Gráfico xyz da biblioteca nas três primeiras componentes principais

Para prever o Mérito, avaliamos varias opções para calibrar, ou seja, para estabelecer uma correlação entre a resposta do instrumento e os valores analisados nas amostras. Correlacionamos os espectros com as notas Mérito obtidas pela equipe, aplicando técnicas de calibração multi variadas baseadas no algoritmo PLS (*Partial Least Squares*), uma versão melhorada da poderosa ferramenta de redução de dimensões PCA (*Principal Components Analysis*) (Beebe, Pell & Seasholtz, 1998).

Para comparar, implementamos inicialmente o método mais convencional chamado de *Global Calibration* (GLOBAL), o qual estabelece uma única equação de regressão utilizando todas as amostras da biblioteca. Ademais testamos um recente método chamado *Local Calibration* (LOCAL), cujo alvo é de selecionar numa biblioteca um certo numero de vizinhos, aqueles com espectros mais próximos a uma amostra incógnita em base a sua distância como definida por Mahalanobis (1936). Os vizinhos são utilizados para produzir uma equação dedicada a cada amostra individual. Em ambas tentativas previmos um conjunto de 1447 amostras incógnitas (*test set*) restringindo os comprimentos de onda a um intervalo privado de somente 84 pontos, como sugerido pelas nossas experiências precedentes.

Resultados e Discussão

O método de calibração local tem sido desenvolvido para avaliar grandes quantidades de dados (espectros e valores analisados), usando o conceito de previsão de amostra individual em tempo real (Shenk, 2000). Já foi demonstrado que este método fornece, com PLS, resultados tão bons como as técnicas tradicionais (Barton et al. 2000).

Estatísticas de validação

A tabela numero 1 mostra a estatística das previsões, LOCAL comparada com GLOBAL:

	Standard Error of Prediction (SEP)	Regression Slope	R-squared
LOCAL	0.910	0.587	0.400
GLOBAL	0.949	0.436	0.308

Tab. 1 Estatísticas de previsões obtidas pelos dois métodos

Os dados R ao quadrado podem parecer pouco significativos, se comparados a aqueles usualmente obtidos com componentes químicos; entretanto isto não surpreende quando se considera que os espectros de café cru são utilizados para prever a qualidade de uma bebida de café, preparada através de uma série de operações: torrefação, moagem, extração, degustação. Além disso, trabalhamos com variáveis sensoriais, que costumam ser influenciadas por erro experimental entre sessões, ou entre provadores.

Avaliação das previsões

Avaliamos o desempenho de nossas previsões separando as 1447 amostras em duas classes conforme seus Méritos: a primeira, que inclui as que estão abaixo de um limiar (*cutoff*), contém aquelas amostras que seriam eliminadas *a priori* num ambiente industrial, sem tampouco passar pela equipe. Definindo que uma amostra seria aceita como “good” (boa) pela equipe quando maior que um Mérito dado, calculamos o percentual de amostras eliminadas que teriam sido avaliadas como *good*, e as definimos como “*missed good coffees*” (cafês bons perdidos), ou seja boas amostras de café que não conseguimos nos vincular. Paralelamente, o número de amostras que seriam consideradas “*no good*” (ruins), dividido pelo total das amostras eliminadas, foi chamado “*bypassed bad coffees*” ou seja amostras ruins das quais nós evitamos o incomodo de uma degustação desnecessária .

Estimativa do desempenho

A variação dos *missed good coffees* e dos *bypassed bad coffees* em função do parâmetro *cutoff* é ilustrada na figura 2, cujo uso sugerimos como uma curva operativa onde, escolhendo um *cutoff*, se pode estimar o desempenho de uma previsão feita por LOCAL, em termos de incomodo evitado ao degustador ao custo de perder algumas boas amostras.

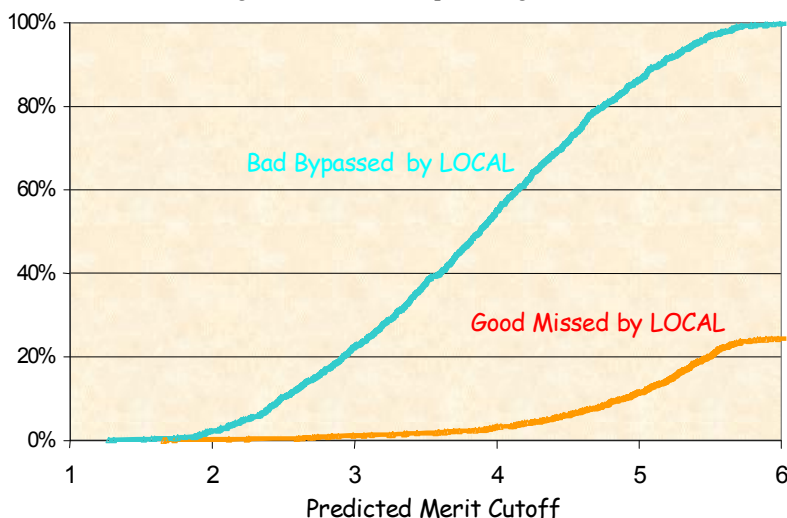


Fig 2. Curva operativa para estimar o desempenho da previsão

Comparação dos algoritmos para a calibração

Um exercício similar foi feito com as previsões pelo GLOBAL. Na figura 3, onde são comparadas as curvas operativas de ambos algoritmos, se pode ver como a previsão pelo LOCAL consente maior economia no intervalo interessante para a prática (ao redor do *cutoff* 3). As perdas de amostras boas são parecidas. O conjunto destes resultados evidencia que a técnica de regressão LOCAL desempenhou sua tarefa com melhor êxito que a calibração GLOBAL, mostrando-se adequada à indústria de torrefação.

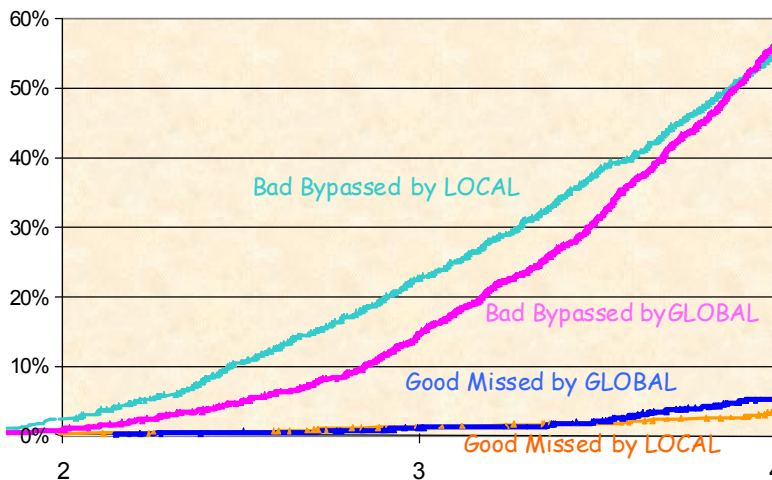


Fig 3. Curvas operativas das previsões LOCAL e GLOBAL, comparadas no intervalo industrial

É útil destacar que seja perdas que ganhos crescem monotonicamente com o aumento do *cutoff* (vide Fig.4, obtida pela combinação das duas curvas da Fig.2 eliminando o parâmetro *cutoff*). Isso significa que um *cutoff* ideal não existe: é sempre necessário um compromisso que depende de vários fatores entre os quais disponibilidade de recursos ou perda aceitável.

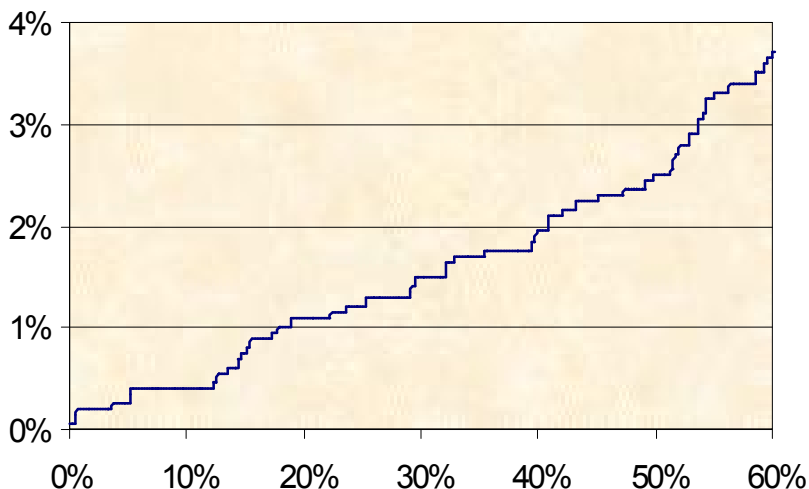


Fig.4 Gráfico do desempenho das previsões mostrando a percentual de perdas em função da economia de incomedo.

Conclusões

Limitando-nos a considerar o prazer sensorial, poucas experiências quotidianas podem competir com uma boa xícara de café, cujo valor é determinado pelo conjunto de seus impactos sensoriais. Neste contexto, o café *espresso* é o que oferece ao consumidor a mais poderosa experiência, mesmo sendo difícil produzir uma xícara de excelente qualidade. A ferramenta que garante essas características, a equipe de degustadores, custa caro em termos econômicos e de tempo; conseqüentemente pode se verificar que o número de amostras avaliadas por dia não satisfaça as necessidades industriais mais ambiciosas.

Seria ideal dispor de um método instrumental para rejeitar *a priori* aquelas amostras que a equipe rejeitaria inevitavelmente: ele deve ser, além de rápido e não destrutivo, confiável. Certamente a espectroscopia de transflexão preenche os dois primeiros pré-requisitos, enquanto a confiança deve ser demonstrada por um procedimento de avaliação. Neste trabalho pretendemos mostrar como configurar um procedimento deste gênero, capaz de estimar o desempenho da espectroscopia NIR, aplicada às amostras de café ouro, nas previsões de qualidade da bebida café *espresso*.

Referências Bibliográficas

- Illy, A. and Viani, R. (eds). (2005) *Espresso Coffee: The Science of Quality*. London (UK), Elsevier Academic Press.
- Petracco, M. (2001) Beverage Preparation: Brewing Trends for the New Millennium. In: Clarke, R.J. and Vitzthum, O.G. (eds). *Coffee Recent Developments*. Oxford (UK), Blackwell Science Ltd. pp. 140-164.
- Vitzthum, O.G. (1999) Thirty Years of Coffee Chemistry Research. In: Teranishi, R. *et al.* (eds). *Flavor chemistry. Thirty Years of Progress*. New York, NY (USA), Kluwer Academic/Plenum Publishers. pp. 117-133.
- Meilgaard, M.; Civille, G.V. and Carr, B.T. (1999) *Sensory Evaluation Techniques - 3rd Edition*. Boca Raton, FL (USA), CRC Press.
- I.C.O. (1991) *Sensory Evaluation of Coffee*. London (UK), Intern'l. Coffee Organization.
- Petracco, M. (1989) Physico-chemical and Structural Characterisation of Espresso Coffee Brew. *Proceedings of the 13th ASIC Colloquium: Paipa (Colombia)*. Paris (France), ASIC, pp.246-261.
- Murray, I. and Williams, P.C. (1987) Chemical Principles of Near-Infrared Technology. In Williams P. and Norris K. (eds). *Near-Infrared Technology in the Agricultural and Food Industries*. St.Paul, MI (USA), American Association of Cereal Chemists, pp. 17-34.
- Shenk, J.S. (1992) NIRS Analysis of natural agricultural products. In: Hildrum, K.I. *et al.* (eds). *NEAR INFRA-RED SPECTROSCOPY, Bridging the gap between Data Analysis and NIR Applications*. New York, NY (USA), Ellis Horwood. pp. 235-240.
- Davrieux, F.; Laberthe, S.; Guyot, B. and Manez, J.C. (2001) Prediction of Arabica Content from Ground Roasted Coffee Blends by Near Infrared. *CD-ROM Proceedings of the 19th ASIC Colloquium: Trieste (Italy)*. Paris (France), ASIC.
- Downey, G. and Boussion, J. (1996) Coffee authentication by near infrared spectroscopy. In: Davies, A.M.C. and Williams, P. (eds). *Near Infrared Spectroscopy: The Future Waves*. Chichester (UK), NIR Publications. p.410.
- Guyot, B.; Davrieux, F. and Vincent, J.C. (1993) Détermination de la caféine et de la matière sèche par spectrométrie proche infrarouge. Applications aux cafés verts Robusta et aux cafés torréfiés. *Proceedings of the 15th ASIC Colloquium: Montpellier (France)*. Paris (France), ASIC. pp.626-636.
- Feria-Morales, A.M. (1991) Correlation between sensory evaluation data (taste and mouthfeel) and near infrared spectroscopy analyses. *Proceedings of the 14th ASIC Colloquium: S.Francisco (USA)*. Paris (France), ASIC. p.622.
- Petracco, M. (2000) Organoleptic properties of espresso coffee as influenced by coffee botanical variety. In Sera, T. *et al.* (eds). *Coffee Biotechnology and Quality*. Dordrecht (The Netherlands), Kluwer Academic Publishers, pp.347-353.
- Beebe, K.R.; Pell, R.J. and Seasholtz, M.B. (1998) *Chemometrics: A Practical Guide*. New York, NY, (USA), John Wiley & Sons.
- Mahalanobis, P.C. (1936) On the generalized distance in statistics, *Proc. Natl. Inst. of Science of India*, 12, 49-55.
- Shenk, J.S. (2000) *WinISI II Manual*. Port Matilda, PA (USA), Infrasoft international.
- Barton, F.E.; Shenk, J.S.; Westerhaus, M.O. and Funk, D. (2000) The development of near infrared wheat quality models by locally weighted regressions, *J. Near Infrared Spectrosc.*, 8, 201-208.