



UNIVERSIDADE DA INTEGRAÇÃO INTERNACIONAL DA LUSOFONIA AFRO-  
BRASILEIRA  
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA - ICEN  
CURSO DE LICENCIATURA PLENA EM QUÍMICA

MATEUS MOISÉS MUTOCOLA

**USO DA ESPECTROSCÓPIA NA REGIÃO DO INFRAVERMELHO PRÓXIMO  
(NIR) EM ESTUDO EXPLORATÓRIO DE CAFÉS ANGOLANO**

REDENÇÃO-CE

2024

MATEUS MOISÉS MUTOCOLA

**USO DA ESPECTROSCÓPIA NA REGIÃO DO INFRAVERMELHO PRÓXIMO  
(NIR) EM ESTUDO EXPLORATÓRIO DE CAFÉS ANGOLANO**

Trabalho de conclusão do curso apresentada a Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, como requisito para obtenção do título de Gr. Licenciado em Química.

Orientadora: Profa. Dra. Livia Paulia Dias Ribeiro

REDENÇÃO-CE

2024

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira  
Sistema de Bibliotecas da UNILAB  
Catalogação de Publicação na Fonte.

---

Mutocola, Mateus Moises.

M986u

Uso da espectroscopia na região do infravermelho próximo NIR em estudo exploratório de cafés angolano / Mateus Moises Mutocola. - Redenção, 2024.

30f: il.

Monografia - Curso de Química, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Redenção, 2024.

Orientador: Prof<sup>a</sup> Livia Paulia Dias Ribeiro.

1. Café - Angola. 2. Análise química. 3. Espectroscopia de infravermelho. I. Título

CE/UF/BSP

CDD 641.3373

---

MATEUS MOISÉS MUTOCOLA

**USO DA ESPECTROSCÓPIA NA REGIÃO DO INFRAVERMELHO PRÓXIMO  
(NIR) EM ESTUDO EXPLORATÓRIO DE CAFÉS ANGOLANO**

Dissertação julgada e aprovada para obtenção do título de Graduação em Licenciatura plena em Química pela Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira - UNILAB – Campus das Auroras.

Aprovado em: \_\_\_/ \_\_\_/ \_\_\_

**BANCA EXAMINADORA**

Orientadora

---

Profa. Dra. Lívia Paulia Dias Ribeiro  
Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira-UNILAB-CE

Examinador Interno

---

Prof. Dr. Prof. Dr. Francisco Nildo da Silva  
Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira-UNILAB-CE

Examinador Externo

---

Doutorando Monis Neves Baptista Manuel  
Universidade Federal do Paraná - UFPR

Dedico este trabalho aos meus pais e a minha família.

## AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço a Deus todo poderoso, por permitir a concretização desta etapa, aos meus pais, avós, tios e todos os familiares pelo apoio, parceria, dedicação de forma incondicional, pela amizade e companheirismo.

À minha orientadora Profa. Dra. Livia Paulia Ribeiro, pela orientação sábia, paciência e incentivo constante ao longo deste processo, seus conhecimentos e experiências foram fundamentais para o desenvolvimento deste trabalho e agradeço assim bastante conhecimento.

Ademais, agradeço aos professores/as do curso pelas sugestões e críticas construtivas durante as etapas do desenvolvimento do projeto e ao meu grupo de pesquisa Núcleo Avançado de Tecnologias Analíticas (NATA).

Ao Instituto Nacional de Café de Angola (INCA), em especial ao Diretor Geral do Instituto José Cassule Mahinga por participar diretamente desta pesquisa, fornecendo as amostras de cafés de variedades Robusta vindo do próprio Instituto e sem esquecer das suas experiências contada nesta área. Suas observações foram essenciais para melhorar a qualidade deste trabalho.

A todos os meus amigos, expressei minha sincera gratidão pelo apoio incondicional. Suas palavras de encorajamento e compreensão foram a luz que me guiou nos momentos difíceis.

Não posso deixar de mencionar meus colegas de curso e os meus companheiros de fase na UNILAB, que compartilharam experiências, conhecimentos e camaradagem ao longo destes anos. Juntos, enfrentamos desafios e celebramos conquistas, criando memórias que levarei para toda a vida.

Por fim, agradeço à UNILAB, a todos os servidores, dos mais diversos setores, que trabalham incansavelmente para nos proporcionar um ensino de qualidade.

Este trabalho não seria possível sem o apoio generoso de todos vocês. Muito obrigado por fazerem parte desta jornada e por contribuírem para o meu crescimento acadêmico e pessoal.

## RESUMO

O objetivo principal deste estudo é realizar uma análise exploratória das diferentes variedades de café produzidas em Angola, fornecidas pelo Instituto Nacional do Café de Angola (INCA) e adquiridas no mercado informal de Luanda. A análise visa comparar a composição química das amostras através das bandas de absorção molecular na região do infravermelho próximo, utilizando a técnica NIR. Foram selecionadas 12 amostras de café, os grãos de café, tanto crus quanto torrados, foram descascados, moídos e padronizados granulometricamente. As amostras foram armazenadas em recipientes fechados e refrigerados para preservar suas propriedades. Utilizou-se um espectrofotômetro portátil MicroNIR para obter os espectros das amostras na faixa de 1.100 nm a 1.700 nm, com resolução de  $4\text{ cm}^{-1}$ . As medições foram realizadas em triplicata, utilizando frascos de vidro de 5 mL como porta amostras. Os dados espectrais foram tratados usando o software The Unscrambler® 10.4X, aplicando técnicas de pré-tratamento como Correção Multiplicativa de Sinal (MSC), Primeira Derivada e Padrão Normal de Variação (SNV). Posteriormente, foi aplicada a Análise de Componentes Principais (PCA) para identificar padrões e variações entre as amostras. Os resultados obtidos indicam diferenças significativas na composição química das amostras de café analisadas. A técnica NIR demonstrou ser eficaz na discriminação entre os diferentes tipos de café, tanto crus quanto torrados. As análises revelaram variações nos processos de torrefação e qualidade das amostras, refletindo as condições de cultivo e processamento.

**Palavras-chave:** Espectroscopia NIR; Café Angolano; Análise Química.

## ABSTRACT

The main objective of this study is to carry out an exploratory analysis of the different varieties of coffee produced in Angola, supplied by the National Coffee Institute of Angola (INCA) and purchased in the informal market in Luanda. The analysis aims to compare the chemical composition of the samples through molecular absorption bands in the near-infrared region, using the NIR technique. 12 coffee samples were selected, the coffee beans, both raw and roasted, were peeled, ground and particle size standardized. The samples were stored in closed and refrigerated containers to preserve their properties. A portable MicroNIR spectrophotometer was used to obtain the spectra of the samples in the range of 1,100 nm to 1,700 nm, with a resolution of 4 cm<sup>-1</sup>. Measurements were carried out in triplicate, using 5 mL glass vials as sample holders. The spectral data were processed using The Unscrambler® 10.4X software, applying pre-treatment techniques such as Multiplicative Signal Correction (MSC), First Derivative and Standard Normal Variation (SNV). Subsequently, Principal Component Analysis (PCA) was applied to identify patterns and variations between samples. The results obtained indicate significant differences in the chemical composition of the coffee samples analyzed. The NIR technique has proven to be effective in discriminating between different types of coffee, both raw and roasted. Analyzes revealed variations in roasting processes and sample quality, reflecting growing and processing conditions.

**Keywords:** NIR Spectroscopy; Angolan Coffee; Chemical Analysis.



## LISTA DE FIGURAS

<b>Figura 1-</b> Pastor Kaldi e suas cabras .....	10
<b>Figura 2-</b> Zona de cultivo de arabica e canephora/robusto .....	13
<b>Figura 3-</b> Organização das 12 amostras de cafés na bancada do laboratório .....	15
<b>Figura 4-</b> Momento da trituração das amostras no laboratório .....	16
<b>Figura 5-</b> Obtenção dos espectros das amostras de café usando o MicroNIR. ....	17
<b>Figura 6-</b> Dados espectrais, com pré-tratamento SNV, das amostras de café de Angola coletadas no mercado do Kikolo e disponibilizadas pelo INCA .....	20
<b>Figura 7-</b> Espectro com pré-tratamento SNV e 1ª derivada .....	21
<b>Figura 8-</b> Gráfico dos escores da PCA das amostras de café torrado do INCA e adquiridos no mercado de Luanda. ....	22
<b>Figura 9-</b> Gráfico dos pesos dos comprimentos de onda que influenciaram na separação das amostras do mercado e das amostras do INCA. ....	22
<b>Figura 10-</b> Comparação dos dados espectrais do café angolano com uma amostra de café sombreado, da espécie Arábica. ....	23

## SUMÁRIO

<b>1 INTRODUÇÃO .....</b>	<b>8</b>
<b>2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....</b>	<b>9</b>
2.1 Café e origem.....	9
2.2 Café angolano .....	11
2.3 Variedades do café.....	12
2.4 Espectroscopia do infravermelho próximo (NIR) .....	13
2.5 O uso da técnica NIR para investigação de alimentos não destrutivos e controle de qualidade.....	14
<b>3 MATERIAIS E MÉTODOS .....</b>	<b>15</b>
3.1 Obtenção das amostras .....	15
3.2 Preparo das amostras.....	16
3.3 Obtenção de dados espectrais .....	17
3.4 Tratamento de dados.....	17
<b>4 RESULTADOS E DISCUSSÕES .....</b>	<b>20</b>
<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS.....</b>	<b>24</b>
<b>REFERÊNCIAS .....</b>	<b>25</b>

## 1 INTRODUÇÃO

A produção de café em Angola já foi bastante significativa, chegando a ser o terceiro maior produtor mundial, no século XIX. No entanto, as coisas mudaram significativamente, por intermédio da guerra civil que se seguiu após a independência do país (1975 - 2002), que resultou na desestruturação e no abandono dos proprietários dedicados à produção, exploração e exportação do produto. Entretanto, com o esforço e o apoio de algumas instituições públicas, empresários e fazendeiros na luta pela recuperação deste setor, vêm dando sinais positivos e esperança nos produtores familiares, uma vez que, este setor é o alicerce da atividade cafeeira do país (PERFECT DAILY GRIND, 2022).

Segundo o diretor geral do Instituto Nacional de Café de Angola (INCA), Vasco Gonçalves (2024), Angola apresenta uma área de cultivo de café igual a 53.000 hectares, e mais de 25.863 mil são cafeicultores tradicionais, na qual 77,68 % da produção é praticada pelas explorações agrícolas familiares e 22,32 % pelo sector empresarial.

Nesse sentido, as produções de cafés, estão concentradas nas 10 maiores províncias produtoras do país, sendo que a província do Cuanza Sul se destaca como a principal produtora com mais de 50% da produção nacional. As principais variedades de café produzidas em Angola são: Robusta que apresenta 90 % da produção nacional e Arábica com apenas 10%. Assim, o café robusta que (Ambriz, Cabinda e Cazengo) é característico das províncias do Bengo, Cabinda, Kwanza Sul, Kwanza Norte, Malange e Uíge e o café arábica das províncias de Benguela, Bié, Huambo e Huíla (PERFECT DAILY GRIND, 2022).

Dessa maneira, o INCA, é uma instituição pública pertencente ao ministério da agricultura e florestas, integrado na administração do Estado, dotado de autonomia administrativa, financeira e património próprio. Ao nível dos municípios, o INCA funciona em brigadas, designadas por técnicas do café. Ela tem como objetivo principal, promover o fomento da cultura do café através da revitalização de toda a cadeia produtiva, oferecendo mudas de sementes aos agricultores familiares e produtores de café, a fim de proporcionar o aumento da produção, a melhoria de qualidade da produção e maior volume de exportação.

Segundo o especialista do instituto Mahinga (2024), realça que, com essa nova campanha nacional de renovações de plantações velhas, através da produção massiva dessas mudas, em 2023 chegou-se a produção de mais de ano passado chegaram a produzir 12 milhões de mudas.

O monitoramento de qualidade do café depende das suas características básicas como: aroma, sabor e acidez. Tradicionalmente essas características são avaliadas por analistas competentes, porém este método sensorial humano é imparcial e não confiável. A implementação de técnicas analíticas é vital para garantir o controle de segurança e qualidade de produtos alimentícios ou suplementos à base de compostos naturais. Para avaliação de autenticidade e rastreabilidade pode ser utilizada a espectroscopia conciliada com métodos quimiométricos, por apresentarem um maior rapidez e precisão, sendo a espectroscopia no infravermelho próximo (NIR).

A Espectroscopia de Infravermelho Próximo (NIRS), é uma técnica analítica não destrutiva, na qual se obtém informações químicas proveniente da interação da radiação eletromagnética com os constituintes da amostra, compreende as bandas de absorção correspondente a qualquer molécula contendo as ligações C-H, O-H, N-H, e S-H, sem algum pré-tratamento da amostra (PASQUINI, 2003). A técnica NIR, tem sido empregada em diversos estudos em cafés brasileiros com objetivos de identificar adulterações, controle de qualidade e diferenciação de espécies por meios das empregações dos métodos de análises quimiométricos (ZAREEF *et al.*, 2020; MANUEL, 2021).

Partindo do pressuposto, este trabalho tem como objetivo realizar estudo exploratório de cafés produzidos em Angola, com variedades fornecidas pelo INCA e adquiridas no mercado informal do Kikolo, em Luanda, com interesse em comparar a composição química, através das bandas de absorção molecular na região do infravermelho próximo (NIR).

Sendo que a produção agroflorestal dos cafés de Angola possui similaridades com a produção agroflorestal do Maciço de Baturité, este estudo propõe encontrar aproximação química dos cafés torrados e crus empregando Análise de Componentes Principais (PCA).

## **2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA**

### **2.1 Café e origem**

A história do café remonta ao século IX. Diz a lenda que um pastor de nome Kaldi que morava em Absínia, atualmente Etiópia, por volta de mil anos, quando observou que as suas cabras ficavam alegre e saltitantes na medida que mastigavam os frutos de coloração amarelo-avermelhada dos arbustos existente em alguns campos de pastoreio, imagem ilustrativa na Figura 1. Diante disso, notou que as frutas eram fonte de alegria e motivação dos seus rebanhos,

e somente com ajudas destas sementes conseguiam percorrer longas distâncias. Certo dia, seguiu-as até o topo da montanha e provou alguns grãos e o resultado foi impressionante. Portanto, tornou-se alegre e bem-humorado (ENCARNAÇÃO, 2003; NEVES, 1974).

**Figura 1-** Pastor Kaldi e suas cabras



**Fonte:** NEVES (1974).

A bebida de café apreciada por milhões de pessoas em todo o mundo resulta de sementes torradas de árvores pertencentes à família botânica Rubiaceae, gênero *Coffea* (MANGAL, 2007). Portanto, sendo uma solução aquoso a partir dos grãos torrados e moídos, além da cafeína ser um dos principais elemento do café, ela contém outros compostos químicos, tais como, ácidos clorogênico/quinídeos, niacina, sais minerais e centenas de compostos voláteis responsáveis pelo aroma e o sabor. Na perspectiva alimentícia, todos esses elementos tornam o café uma bebida saudável e rica em propriedades nutricionais (NEVES, 1974).

Atualmente, das centenas de espécies de *Coffea*, apenas duas assumem importância económica, o café arábica e a robusta. O café da espécie arábica é originário da Etiópia, centro da África e se espalha para o resto do mundo por meio do Egito e da Europa, no século XIV (MANGAL, 2007). A palavra café é derivada do árabe Qahwa que significa vinho ou outras bebidas alcoólicas intoxicantes (FARAH, A., 2019).

Dessa forma, o arábica é um café de maior qualidade e de maior valor agregado, normalmente cultivado em áreas mais frias e elevadas dos trópicos e subtropicais, a mil m ou mais acima do nível do mar. Ele é utilizado no mercado de café torrado e moído e é adicionado a misturas de robusta para melhorar a qualidade do café solúvel. Sendo que, o Brasil e Colômbia são os principais países produtores desse tipo de café. O robusta é um café de qualidade inferior, com preços normalmente cerca de 30 a 40% inferiores aos do arábica.

A robusta é normalmente cultivada em áreas mais quentes e em altitudes mais baixas, inadequadas para o arábica, e é considerado resistente/tolerante à ferrugem do café. O Vietnã, Brasil e a Indonésia são os maiores produtores desta espécie, (MANGAL, 2007). Em comparação com o arábica, a robusta é geralmente mais vigorosa, mais produtiva e menos vulnerável à ferrugem. Tendo isso, como uma cultura intensiva, o café (*Coffea* sp.) é um dos principais geradores de emprego nos países de produção e desempenha um papel significativo na estrutura e desenvolvimento social de seus respectivos países. O café é produzido em cerca de 60 países na América Latina, África, Ásia e Oceania, fornecendo subsídios para cerca de 25 milhões de famílias de agricultores (MANGAL, 2007; FARINHOTO, 2012).

## **2.2 Café angolano**

O cultivo do café robusta em Angola tem uma história peculiar com mais de 190 anos. Ao longo deste tempo a produção de café foi influenciada pelos modelos de desenvolvimento económico do país e, neste momento, a cafeicultura angolana precisa de um renascimento.

Com um território de 1.246.700 km<sup>2</sup>, Angola é um dos maiores países da África Subsaariana. É, no entanto, um país demograficamente heterogéneo. Possui uma das densidades demográficas mais baixas do mundo, com apenas 25 habitantes por km<sup>2</sup>. No contexto africano, a Nigéria, por exemplo, regista 215 habitantes por km<sup>2</sup>. A população é de 25,7 milhões de habitantes, 62,3% vivendo em áreas urbanas, de acordo com o Censo Geral da População e Habitação, de 2014 (BESSOU, C. et al. 2020).

O café robusta angolano, representado pelos seus ecótipos locais (café amboim, ambriz, cazengo, makokola e cabinda) é produzido em sistema de monocultura com manejo agro-

ecológico mediante sombreamento e em regime de sequeiro. Três tipos de produtores compõem o sistema produtivo, tendo como base o modelo ecológico, os tratos culturais com uso ou não de tecnologia moderna, (MAHINGA, 2021).

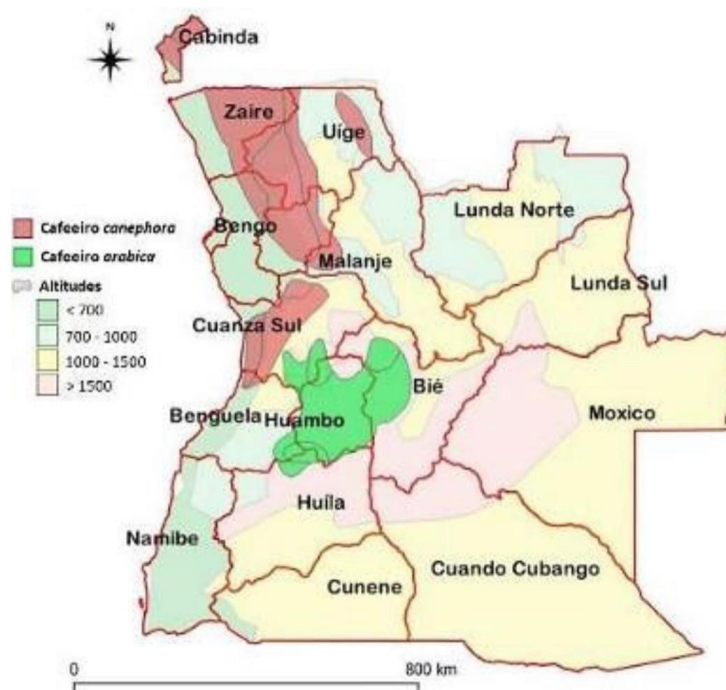
Contudo, a altitude é um papel importante no sabor e na qualidade de cafeína do café. Ele refere que a variedade *Coffea canephora* amboim é conhecida pelo seu sabor mais doce em comparação com outras variedades robustas da África, com a variedade Ambriz posicionada intermediariamente em termos de sabor. Considerando o aspecto botânico, a robusta, amboim e Ambriz são variedades distintas da espécie *Coffea canéfora*. Contudo, em Angola, é comum referir-se a elas popularmente com robusta amboim e robusta ambriz (BESSOU, C. et al. 2020).

### **2.3 Variedades do café**

Angola cultiva ambas as espécies de cafés, tanto arábica, quanto *canephora* / robusta. A espécie *Coffea canephora* é nativa da bacia do Congo e inclui várias variedades cultivadas na África Ocidental e em Angola. Essas diversidades são agregadas comercialmente sob o nome de robusta. Os ecótipos Amboim, Ambriz e Cazengo são exemplos de multiplicidades espontâneas de *Coffea canephora* cultivados nas regiões norte do país (Cuanza Sul, Uíge e Cuanza Norte), enquanto o arábica é cultivado nos centros/suis e leste do país (Huambo, Bié, Benguela, Huíla) e leste (Lundas, zona de expansão) com altitude acima de mil m, respectivamente, e são exclusivas do cultivo angolano (BESSOU, C. et al. 2020), ilustrado na Figura 2.

Desse modo, os procedimentos ambientais específicos estão estreitamente ligados à altitude, pelo que o mapa das áreas de cultivo de cada espécie se sobrepõe com o mapa de altitudes. (BESSOU, C. et al. 2020).

**Figura 2-** Zona de cultivo de arabica e canephora/robusto



Fonte: BESSOU. et al. (2020).

## 2.4 Espectroscopia do infravermelho próximo (NIR)

A Espectroscopia de Infravermelho Próximo (NIRS) é uma técnica analítica baseada na espectroscopia vibracional proveniente da interação da radiação eletromagnética com os constituintes da amostra na faixa de comprimento de onda entre 750 e 2500 nm (13300 a 4000  $\text{cm}^{-1}$ ), e mede a energia absorvida pelas moléculas, de forma que os grupos funcionais presentes nessas moléculas contêm 28 informações analíticas quantitativas e qualitativas a respeito da amostra (PASQUINI, 2003; ZAREEF et al., 2020).

Dessa maneira, para facilitar os cálculos dos dados obtidos dessa técnica, usa-se a quimiometria que é um ramo da química analítica que usa a técnicas matemáticas e estatísticas para extração de informações importantes a partir de dados analíticos, como os dados espectrais NIR, facilitando assim a sua interpretação (PASQUINI, 2003).



## **2.5 O uso da técnica NIR para investigação de alimentos não destrutivos e controle de qualidade.**

O uso da espectroscopia NIR na indústria de alimentos tem uma longa história como uma técnica não destrutiva, não invasiva, rápida e eficaz. Há muitas vantagens, como pouca ou nenhuma necessidade de preparação da amostra; rápido, menor custo que as técnicas convencionais; e capacidade de analisar uma ampla gama de produtos; e com base em tudo isso, a espectroscopia NIR torna-se ideal para o monitoramento da qualidade de alimentos e produtos alimentícios (ZAREEF et al., 2020).

Uma aplicação bem-sucedida da tecnologia NIR no campo analítico depende de uma série de fatores igualmente relevantes. A maioria das vantagens da espectroscopia NIR vem da possibilidade de usar amostras intactas apresentadas diretamente ao instrumento sem nenhum pré-tratamento. Esse fato implica na promoção da interação não convencional da radiação com a matéria para extrair as informações espectrais e gerar muitos modos de medição diferentes (PASQUINI, 2003, p. 11).

Diante disso, os cálculos quimiométricos aplicados nas transformações dos dados espectrais de uma determinada amostra, fazem dessa técnica (NIR) ser preciso e rápido, passando assim informações sobre um determinado produto, quanto a sua origem, composição química etc., no monitoramento do controle de qualidade e confiabilidade para as indústrias alimentares.

### 3 MATERIAIS E MÉTODOS

#### 3.1 Obtenção das amostras

Foram obtidas e analisadas 12 amostras de cafés robustos provenientes de Angola, no período de janeiro a abril de 2024, Figura 3. Dessas amostras, 4 nas formas de grãos torrados oriundos do Instituto Nacional de Café de Angola (INCA), 3 nas formas de grãos crus e 5 nas formas de cafés moídos, estas últimas adquiridas no mercado informal do Kikolo, localizado no município de Cacuaco, província de Luanda. Entre as 12 amostras, os 4 cafés fornecidos pelo INCA eram de variedades robustas diferentes, colhidos durante a estação seca do ano de 2023, a saber: Amboim, Cazengo, Ambriz e Cabinda.

**Figura 3-** Organização das 12 amostras de cafés na bancada do laboratório



**Fonte:** autor (2024).

Os materiais usados neste estudo de análise foram: moedor de café Cadence Modelo MDR 302, placa petri, espátulas, papel de toalha, almofariz e pistilo, peneira para análise granulométrica com abertura n°30, 28 mesh, com abertura de 0,60 mm, frascos para análises, notebook e um Modelo Espectrômetro NIR portátil: NIR - S - G1 Inno Spectra (900 nm - 1700 nm).

### 3.2 Preparo das amostras

Separou-se das 12 as amostras, apenas 7 em grãos torrados e crus foram analisadas no laboratório de Química Analítica da Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira-UNILAB - Ceará. Foram descascados grãos de cafés crus com um almofariz e pistilo, Figura 4. Após este processo, as amostras de cafés torradas e cruas, foram moídas em um moedor de café caseiro (Cadence modelo MDR 302) e após serem padronizadas granulometricamente das 7 amostras utilizando peneira n°30, 28 mesh, com abertura de 0,60 mm. As amostras descritas foram identificadas pelos respectivos nomes dos locais cultivados.

**Figura 4-:** Momento da trituração das amostras no laboratório



**Fonte:** Autoria própria (2024).

Posto isso, importante destacar que, após receber as 12 amostras, elas foram armazenadas em um recipiente fechado dentro de uma geladeira no laboratório de Bioquímica da Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira-UNILAB, localizada no Ceará, por um período de um mês. Essa medida foi adotada para garantir a preservação das propriedades físicas e químicas das amostras.

### 3.3 Obtenção de dados espectrais

Para obtenção dos espectros, usou-se o MicroNIR, um equipamento de infravermelho próximo portátil, modelo DLP® NIRscan™ Nano Evaluation Module, Texas Instruments, onde, realizou-se três réplicas para cada amostra na faixa 1.100 nm - 1.700 nm, com a resolução de  $4\text{ cm}^{-1}$ , com medição de 50 varredura/leitura, Figura 5. Frascos de vidro 5 mL foram usados como porta amostra. Os espectros das amostras foram anotados, contra o espectro de referência (branco) de Teflon, em triplicata.

**Figura 5-** Obtenção dos espectros das amostras de café usando o MicroNIR.



Fonte: Autoria própria (2024).

### 3.4 Pré-Tratamento e Tratamento de dados

Para análise de tratamento dos dados espectrais das amostras, usou-se o software The Unscrambler® 10.4X, e o pré-tratamento espectral, (correção multiplicativa de sinal - MSC, Primeira derivada e Padrão Normal de Variação - SNV, com o objetivo de remover matematicamente fonte de variação indesejáveis que não serão desviado naturalmente durante a análises de dados (FERREIRA, 2015), posteriormente ser aplicado ao método de Análise de Componentes Principais (PCA).

### a) Correção Multiplicativa de Sinal - MSC

Para corrigir o efeito do espalhamento de luz presente nos espectros obtidos por técnicas de reflectância, utiliza-se o método de Correção Multiplicativa de sinal (Multiplicative Signal Correction) , na qual é chamada de multiplicative scatter correction ( NAES; MARTINS, 1989). Este método é um processo matemático que minimiza a interferência relativa ao espalhamento da luz corrigindo a linha de base dos espectros de reflectância difusa de modo que todos os espectros possuam o espelhamento ideal - ex.:espectro de referência, (LUYPAERT et al., 2002; AZZOUZ et al., 2003; PEDRO, 2004, PIZARRO et al., 2004; FERREIRA, 2015).

### b) Derivada

Para miminizar os efeitos provocados por partículas na linha de base nos espectros, faz-se aplicação da primeira e segunda derivada sobre os dados espectrais. Logo, as informações contidas ao longo dos diferentes comprimentos de onda são geralmente acentuadas. Porém, a principal desvantagem desse processo é que o ruído uma vez presente nos espectros originais, pode se tornar acentuado, diminuindo a relação de sinal / ruído por isso do cuidado com a qualidade dos espectros quando se pretende aplicar o cálculo das derivadas (FERRÃO, 2000; PIZARRO et al., 2004; MORGANO, 2005; CHEN, 2006).

### c) padrão Normal de Variação - SNV

É método de transformação matemático aplicada para corrigir as interferências de espalhamento e os efeitos do espalhamento multiplicativo entre diferentes amostras (GUO; WU; MASSART, 1999; AZZOUZ et al., 2003; OLIVEIRA, 2004; LUYPAERT et al., 2004).

A transformação Padrão Normal de Variação (Standard Normal Variate Transformation) tem função similar à de Correção Multiplicativa de Sinal. Entretanto, apesar do PNV e MSC terem a mesma finalidade, elas são diferentes (COSTA FILHO, 2003)

A correção feita pelo SNV é de remover o espalhamento através da normalização de cada espectro pelo desvio padrão; ou seja, ela é realizada subtraindo-se o espectro inteiro ( $X_{i,j}$ ) pela média do mesmo espectro, logo, o valor é dividido pelo seu próprio desvio padrão (CANDOLFI et al., 1999; LUYPART et, 2002; HERRERA; GUESALAGA; AGOSIN, 2003;

PIZARRO et al., 2004), desse modo, o SNV não precisa de um espectro ideal

(referência) para fazer a correção dos espectros (COSTA FILHO, 2003).

#### **d) Análise de Componente Principais - PCA**

A Análise de Componentes Principais: é um método matemático usado para maximizar as informações que podem ser extraídas de um conjunto de dados e assim, reduzir o número de variáveis da matriz original dos dados envolvidos no modelamento. Atuando de modo a simplificar a série de dados e reduzir a dimensão dos dados com a finalidade de gerar novas variáveis que não correlacionadas. Por causa dessa habilidade diz-se grosso modo que acontece uma compressão de dados (REIS, 1997; BARTHUS, 1999; MORGANO; QUEIROZ; FERREIRA, 1999; ROGGO et al., 2007).

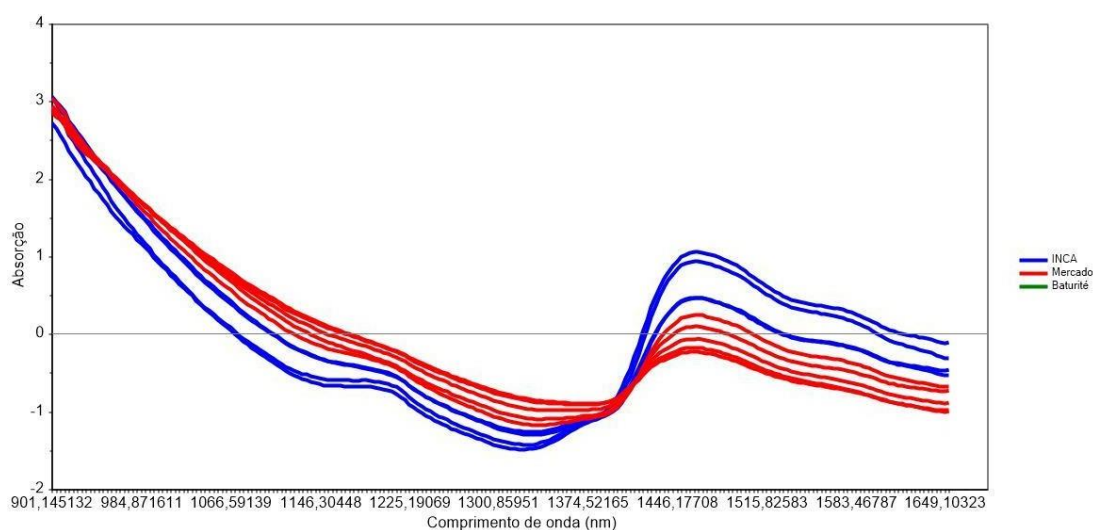
Em vista disso, a Análise de Componentes Principais é um dos métodos de Reconhecimento de Padrões não supervisionado, os quais são usados para examinar similaridades ou diferenças entre as amostras (ROGGO et al., 2007). Assim sendo, PCA é utilizada quando se tem uma grande quantidade de dados que serviriam para representar um sistema e construir modelos de calibração.

No entanto, esse excesso acaba dificultando o tratamento de dados, ou seja, muitos deles podem ser irrelevantes para a análise quimiométrica. Desse modo, análise por PCA pode reduzir essa quantidade de dados, descartando as informações redundantes e, fornecendo um conjunto de dados com informações pertinentes que possibilitam a análise e construção do modelo de um sistema (MARTINS, 1989; MELLO, 1998; BARTHUS, 1999; PEREIRA, 2003).

## 4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os espectros inicialmente foram pré-tratados com SNV para correção de linha de base e eliminação de interferências não espectrais (Figura 6). Foi possível verificar diferenças entre os espectros das amostras adquiridas no mercado do Kikolo (linha vermelha) com os espectros das amostras oriundas do INCA (linha azul). Às regiões de 1.200 nm e 1450 nm são visivelmente diferentes entre elas, sendo as amostras do mercado com menores valores de absorção, sendo possível interpretar, principalmente pela cor das amostras, que foram mais fortemente torradas, perdendo assim os compostos orgânicos com cadeias alifáticas (MELO, 2004).

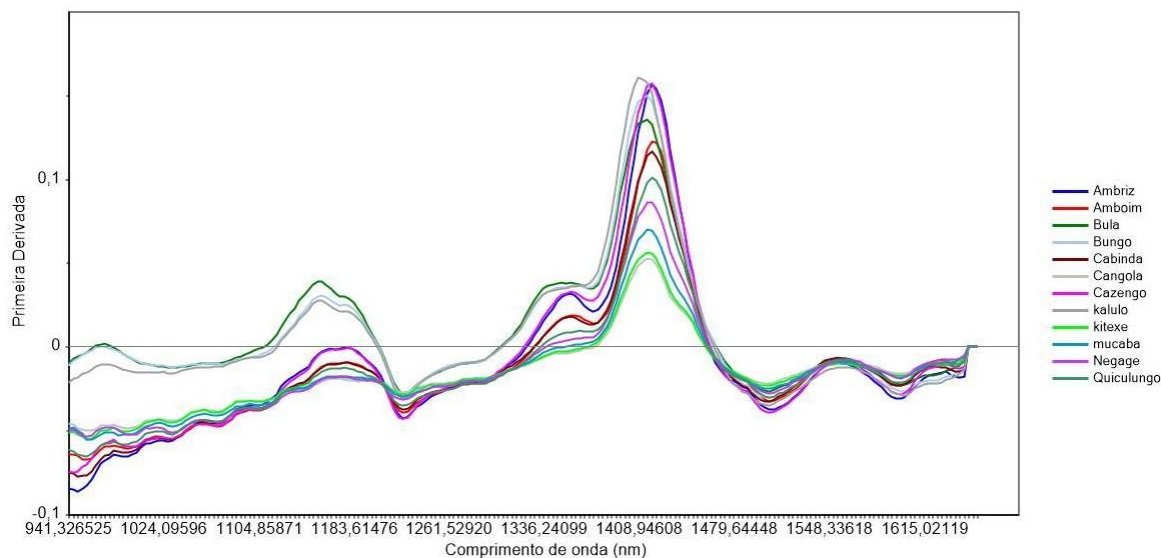
**Figura 6** – Dados espectrais, com pré-tratamento SNV, das amostras de café de Angola coletadas no mercado do Kikolo e disponibilizadas pelo INCA



**Fonte:** Autoria própria (2024)

Os resultados dos pré-tratamentos foram aproximados, sendo então escolhido como método de pré-tratamento com SNV com 1ª derivada (Figura 7), para correção de variações indesejadas que podem ser causadas por diferenças de granulometria da amostra, na dispersão da luz ou em outras condições experimentais que não estão relacionadas à composição química da amostra, pois obtivemos a definição das classes das amostras mais efetivas.

**Figura 7-** Espectro com pré-tratamento SNV e 1ª derivada



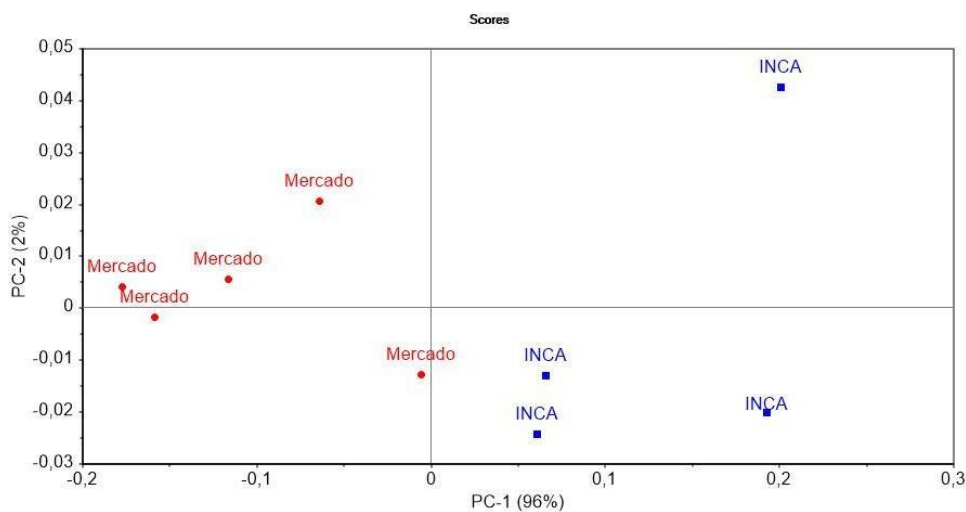
**Fonte:** A autoria própria (2024).

Às regiões espectrais analisadas possuem as seguintes bandas de comprimento de onda com maiores absorções moleculares identificadas: 1.154 nm; 1.180 nm 1.350 nm e 1.450 nm. Segundo a literatura “Practical Guide and Espectral Atlas for Interpretive Near-Infrared Spectroscopy” de (WORKMAN JR; WEYER, 2012): 1154 nm, os hidrocarbonetos alifáticos (ex.: C-H e CH<sub>3</sub>); 1180 nm contém umidade nas amostras de café que se encontram próximo desses valores; 1350 nm 2X C-H, C-H (banda de combinação de estriamento) e CH<sub>3</sub> e 1450 nm, O-H Amido/Polimérico, álcool, C=O (carbonila), cetonas, aldeídos e água, (ISABEL, 2004).

Na Figura 8 está representado o gráfico de escores da componente principal (PC) das amostras, no qual, a PC-1 pode explicar 96% da variável total no conjunto de dados que a variância de dados. As duas primeiras PC, juntas podem explicar 98% da variância total dos dados (KUANG, H, et al., 2015), segundo o Rencher (2002), ao menos 70% da variância total deve ser explicada pelos primeiros e o segundo componentes principais. (CASAL, 2004; FERREIRA, 2003).



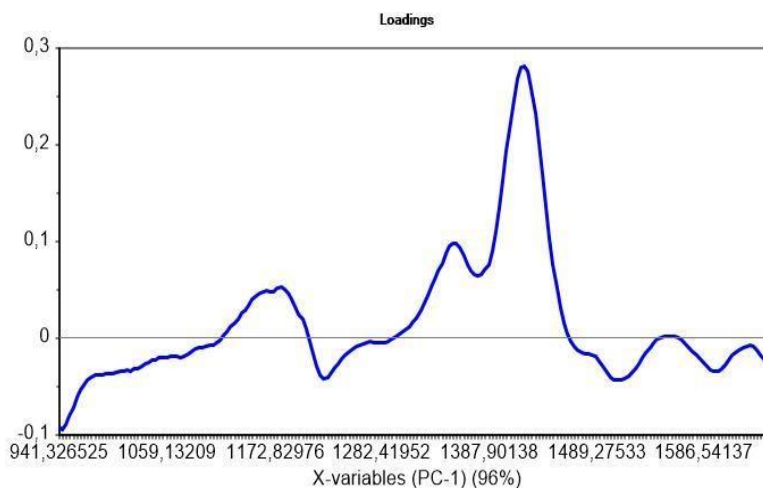
**Figura 8-** Gráfico dos escores da PCA das amostras de café torrado do INCA e do mercado do Kikolo.



**Fonte:** Autoria própria (2024).

As informações coletadas pelo gráfico de escores, ela é explicada na Figura 9, do gráfico denominada gráfico dos pesos dos comprimentos de onda que influenciam bastante na separação das amostras do mercado e do INCA. Quanto aos comprimentos de onda fornecidos pelo gráfico.

**Figura 9-** Gráfico dos pesos dos comprimentos de onda que influenciaram na separação das amostras do mercado do Kikolo e das amostras do INCA.

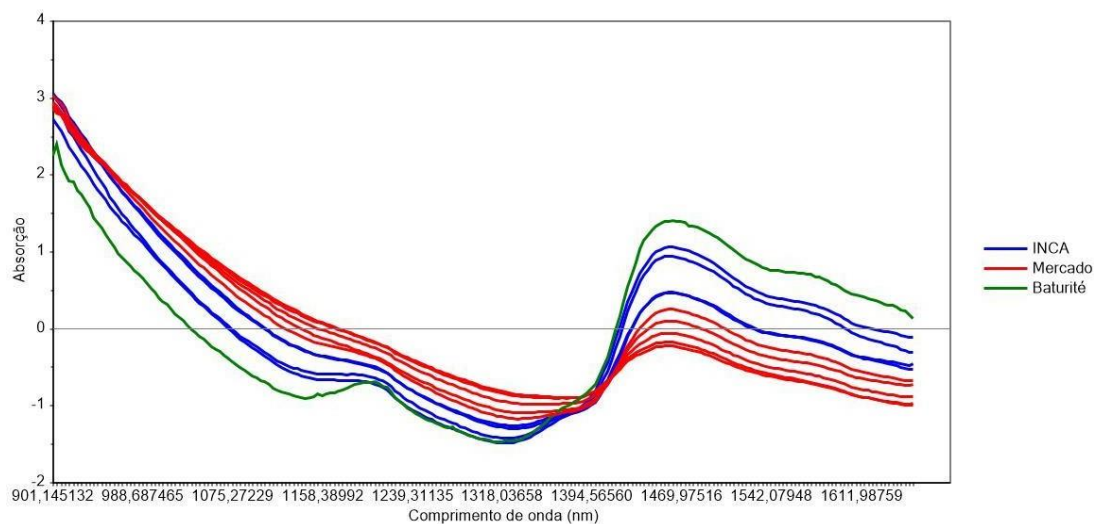


**Fonte:** Autoria própria (2024).

Na Figura 10, podemos observar a comparação dos dados espectrais das amostras dos cafés angolano com uma amostra de café sombreado da espécie arábica, a partir da absorção e do seu comprimento de onda, verificou-se em quais das amostras contém os seus compostos bem definidos em relação a outra. Em algumas amostras de cafés de angolas (amostras do

mercado) encontramos compostos fenólicos em menor abundância nas suas torras, e mais abundância na amostra espectral do café sombreado de Baturité, que na sua composição apresenta uma quantidade de carboidrato, lipídios e trigonelina maior em relação aos cafés robusta (ISABEL, 2004).

**Figura 10-** Comparação dos dados espectrais do café angolano com uma amostra de café sombreado, da espécie Arábica.



**Fonte:** Autoria própria (2024).

## **CONSIDERAÇÕES FINAIS**

Com base neste estudo, percebeu-se que o uso da técnica de análise NIR empregado no controle e na qualidade dos alimentos serviram de grande importância nas análises das amostras de café fornecidas pelo INCA e adquiridos pelo mercado, foi percebido a diferença entre elas, quer no processo da torra, queira na qualidade e no armazenamento delas.

Uso dos métodos quimiométricos tornaram mais claros os resultados apresentados nesta pesquisa exploratória, sendo possível identificar às amostras de diferentes origens, como também identificar a diferença espectral com a amostra do café arábico de Baturité.

Espera-se que este trabalho possa contribuir com a pesquisa do INCA na melhoria da produção de café, como ser o primeiro de vários trabalhos de pesquisa junto com INCA.

## REFERÊNCIAS

AZZOUZ, T.; PUIGDOMÉNECH, A.; ARAGAY, M.; R. TAULER, R. **Comparison between different data pre-treatment methods in the analysis of forage samples using near-infrared diffuse reflectance spectroscopy and partial least-squares multivariate calibration method.** *Analytica Chimica Acta*, v. 484, p.121–134, 2003.

BARTHUS, R.C. **Aplicação de Métodos Quimiométricos para Análises de Controle de Qualidade de Óleos Vegetais utilizando Espectroscopias no Infravermelho e Raman.** 1999. Dissertação (Mestrado), Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP. Campinas, São Paulo;

BESSOU, C.; FARIA, Margarida Lima de; PIAZZARDI, B; FIGUEIREDO, C.; PACHECO, F.; PINA, J. P. SNOECK, D. **Análise da Cadeia de Valor do Café em Angola. Relatório para a União Europeia, DG-DEVCO. Value Chain Analysis for Development Project (VCA4D CTR 2016/375-804),** Abril 2020;

CANDOLFI, A.; MAESSCHALCK, R. De; JOUAN-RIMBAUD, D.; HAILEY, P.A.; MASSART. **The influence of data pre-processing in the pattern recognition of excipients near-infrared spectra.** *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 21, 115–132, 1999;

CASAL, Susana Isabel Pereira. - **Compostos nitrogenados do café.** Desenvolvimento de metodologias analíticas e sua aplicação na discriminação de espécies e no controle da intensidade da torra, 2004, Porto;

CHEN, Q.; ZHAO, J.; ZHANG, H.; WANG, X. **Feasibility study on qualitative and quantitative analysis in tea by near infrared spectroscopy with multivariate calibration.** *Analytica Chimica Acta*, 572, 77–84, 2006.

COSTA FILHO, P. A. **Estudo comparativo entre técnicas de inteligência artificial e modelos lineares em determinações quantitativas no infravermelho próximo.** 2003. Tese (Doutorado), Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP. Campinas, São Paulo;

Decreto Presidencial n.º 7/14 - **Presidente da República** - Diário da República Iª Série n.º 5 de 8 de janeiro de 2014.

ENCARNAÇÃO, Ronaldo de Oliveira - **O café e a saúde humana** / Ronaldo de Oliveira Encarnação, Darcy Roberto Lima. Brasília: Embrapa Café, 2003.

FARAH, A. (Ed.). **Coffee: Production, Quality and Chemistry.** The Royal Society of Chemistry, 2019.

FARINHOTO, Rute Judite Camelo da Rocha. **Análise física e química de cafés verdes com diferentes origens geográficas.** 2012. Dissertação (para obtenção do Grau de Mestre em Tecnologia e Segurança Alimentar) - Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa; Lisboa, 2012.

FERREIRA, Márcia Miguel Castro, 1951 - **Quimiometria – Conceitos, Métodos e Aplicações**/ Márcia Miguel Castro Ferreira – Campinas, SP: Editora da Unicamp, 2015.

FERRÃO, M.F. **Aplicação de técnicas espectroscópicas de reflexão no infravermelho no controle de qualidade de farinha de trigo**. 2000. Tese, Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP. Campinas, São Paulo.

GUO, Q.; WU, W.; MASSART, D.L. **The robust normal variate transform for pattern recognition with near-infrared data**. *Analytica Chimica Acta*, 382, 87-103, 1999;

HONGYU, K.; Sandanielo, V. L. M.; Junior, G. J. O. **Análise de Componentes Principais: resumo teórico, aplicação e interpretação**. *E&S - Engineering and Science*, 2016, 5(1), 85-90.

HERRERA, J.; GUESALAGA, A.; AGOSIN, E. **Shortwave–near infrared spectroscopy for non- destructive determination of maturity of wine grapes**. *Measurement Science and Technology*, 14, 689–697, 2003.

LUYPAERT, J.; HEUERDING, S.; JONG, S. de; MASSART, D.L. An evaluation of direct orthogonal signal correction and other preprocessing methods for the classification of clinical study lots of a dermatological cream. **Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis**, 30, 453- 466, 2002.

LUYPAERT, J.; HEUERDING, S.; HEYDEN, Y.V.; MASSART, D.L. The effect of preprocessing methods in reducing interfering variability from near-infrared measurements of creams. **Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis**, 36, 495–503, 2004.

MANUEL, Monis Neves Baptista. **Classificação one-class do café agroflorestal produzido no Maciço de Baturité/CE**. TCC (Graduação) - Curso de Química, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-brasileira, Redenção-Ceará, 2021.

MAHINGA, José Cassule. Peculiaridade do sistema de produção do café robusta em Angola; In: **Café conilon: Conilon e Robusta no Brasil e no Mundo** / Fábio Luiz Partelli, Lucas Louzada Pereira, Organizadores. – Dados eletrônicos. Alegre, ES: CAUFES, 2021. 214 p. : il.; Mangal, S.K. *Coffee Planting Production and Processing*. New Delhi: Gene-Tech Books, 2007.

MELLO, C.A. **Redes Neurais e Técnicas de Pré-Processamento de Sinais em Espectroscopia de Reflectância no Infravermelho Próximo**. 1998. Tese (Doutorado), Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP. Campinas, São Paulo.

MELLO, W. L. B - **A importância da formação sobre o grau de torra do café e sua influência nas características organolépticas da bebida**. São Carlos: Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária, 2004, p.4.

MORGANO, M.A. **Aplicação de Métodos Quimiométricos em Análise de Alimentos**. 2005. Tese (Doutorado em Ciências), Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP. Campinas, São Paulo.

MORGANO, M.A.; QUEIROZ, S.C.N.; FERREIRA, M.M.C. **Aplicação da Análise**

Exploratória na Diferenciação de Vegetais. **Brazilian Journal of Food Technology**. 2(1, 2): 73-79, 1999.

MUTOCOLA, Mateus Moisés. Orientação de TCC. Destinatário: José Cassule Mahinga. [S. l.], 06.Jul. 2024. 3 mensagens eletrônica.

NÆS, T.; MARTENS, H. *Multivariate Calibration*. John Wiley & Sons Ltda, 1989. NEVES, C. - A história do café. Rio de Janeiro, Instituto Brasileiro do Café, 1974.p. 52.

PASQUINI, C. - Near Infrared Spectroscopy: Fundamentals, Practical Aspects and Analytical Applications. *J. Braz. Chem. Soc.*, Vol. 14, No. 2, 198-219, 2003.

PARREIRA, T.F. **Utilização de Métodos Quimiométricos em Dados de Natureza Multivariada**. 2003. Dissertação (Mestrado), Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP. Campinas, São Paulo.

PEDRO, A. M. K. **Determinação Simultânea e Não-Destrutiva de Sólidos Totais e Solúveis, Licopeno e Beta-Caroteno em Produtos de Tomate por Espectroscopia no Infravermelho Próximo Utilizando Calibração Multivariada**. 2004. Dissertação (Mestrado), Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP. Campinas, São Paulo.

PIZARRO, C.; ESTEBAN-DÍEZ, I.; NISTAL, A.-J.; GONZÁLEZ-SÁIZ, J.-M. **Influence of data pre-processing on the quantitative determination of the ash content and lipids in roasted coffee by near infrared spectroscopy**. *Analytica Chimica Acta*, 509, 217–227, 2004.

PERFECT DAILY GRIND. **Compreendendo a produção de café em Angola** - PDG Brasil. Disponível em: <https://perfectdailygrind.com/pt/2022/12/14/producao-de-cafe-em-angola/>. Acesso em: 04 jul. 2024.

REIS, M.M. **Aplicação de Métodos Quimiométricos em Separação de Espectros e Reconhecimento de Padrões**. 1997. Dissertação (Mestrado), Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP. Campinas, São Paulo.

RENCHER, A.C. **Methods of Multivariate Analysis**. A JOHN WILEY & SONS, INC. PUBLICATION.p.727. 2ed. 2002

ROGGO, Y.; CHALUS, P.; MAURER, L.; LEMA-MARTINEZ, C.; EDMOND, A.; JENT, N.A - **Review of near infrared spectroscopy and chemometrics in pharmaceutical technologies**. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 44, 683–700, 2007.

OLIVEIRA, F. C. C. A - **Escolha da faixa espectral no uso combinado de métodos espectroscópicos e quimiométricos**. *Química Nova*. Vol. 27, No. 2, 218-225, 2004.

WORKMAN JR., J.; WEYER, L. – **Practical Guide and Spectral Atlas for Interpretive Near-Infrared Spectroscopy**. 2ª ed. Boca Raton: CRC Press, 2012.