

XU Congresso
Fluminense
de Iniciação
Científica e Tecnológica

28^o

Encontro de
Iniciação
Científica
da UENF

20^o

Circuito de
Iniciação
Científica do
IFFluminense

16^a

Jornada de
Iniciação
Científica
da UFF



U III Congresso
Fluminense de
Pós-Graduação

23^a

Mostra de
Pós-Graduação
da UENF

8^a

Mostra de
Pós-Graduação
do IFFluminense

8^a

Mostra de
Pós-Graduação
da UFF

Avaliação de metodologias *One-Class Classification* (OCC) para autenticação de cafés especiais usando o ICP-MS

Tayná de Oliveira Costa, Junio Botelho, Maiara Krause, Maria Tereza Weitzel Dias Carneiro, Daniel Coelho Ferreira, Murilo de Oliveira Souza

Devido ao alto valor agregado aos cafés especiais, estes são comumente adulterados com cafés de baixa qualidade para aumentar o volume final, a fim de obter lucro de forma irregular e criminosa. Nas últimas décadas várias técnicas analíticas e métodos quimiométricos foram usadas para a identificação de adulterações. Todavia, alguns métodos quimiométricos podem não ser capazes de classificar adequadamente novas amostras que não pertencem a nenhuma das classes pré-modeladas. Desta forma, este trabalho teve como objetivo identificar adulterações de cafés especiais com grãos de baixa qualidade usando os elementos terras raras e potencialmente tóxicos determinados por ICP-MS e avaliar o desempenho de metodologias *One-Class Classification* (SIMCA, DD-SIMCA e OCPLS). Assim, 50 amostras de café arábica especial (grãos *in natura*) foram doadas por produtores locais. Destas amostras, 6 foram adulteradas com café de baixa qualidade na proporção de 25 a 75% m/m. Dezoito elementos terras raras e 4 elementos potencialmente tóxicos foram determinados por Espectrometria de massa por plasma acoplado indutivamente (ICP-MS) após a decomposição ácida das amostras. Os modelos SIMCA, DD-SIMCA e OCPLS foram construídos a partir dos dados das concentrações dos elementos pré-processados usando autoescalamento (SIMCA e DD-SIMCA) e *optrescale* para o OCPLS. O modelo OCPLS obteve a maior taxa de classificação correta (SEN = 94,2% para conjunto de treinamento; SEN = 100% e SPE = 94,4% para previsão do conjunto de teste). Como a modelagem de uma classe é baseada apenas em amostras da classe-alvo para a construção do modelo, amostras desconhecidas podem ser usadas em previsões futuras. Portanto, este trabalho contribui para o aprimoramento de metodologias que possam ser utilizadas em processos de autenticação.

*Programa de Pós-Graduação em Ciências Naturais
Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro
Bolsa FAPERJ*

ORGANIZAÇÃO E REALIZAÇÃO:



APOIO:



XU Congresso Fluminense de Iniciação Científica e Tecnológica

28^o
Encontro de Iniciação Científica da UENF

20^o
Circuito de Iniciação Científica do IFFluminense

16^a
Jornada de Iniciação Científica da UFF



U III Congresso Fluminense de Pós-Graduação

23^a
Mostra de Pós-Graduação da UENF

8^a
Mostra de Pós-Graduação do IFFluminense

8^a
Mostra de Pós-Graduação da UFF

Evaluation of One-Class Classification (OCC) methodologies for authentication of specialty coffees using ICP-MS

Tayná de Oliveira Costa, Junio Botelho, Maiara Krause, Maria Tereza Weitzel Dias Carneiro, Daniel Coelho Ferreira, Murilo de Oliveira Souza

Due to the high added value of specialty coffees, these are commonly adulterated with low quality coffees to increase the final volume, in order to obtain profit in an irregular and criminal way. In the last decades several analytical techniques and chemometric methods were used for the identification of adulterations. However, some chemometric methods may not be able to adequately classify new samples that do not belong to any of the pre-modeled classes. Thus, this work aimed to identify adulterations of specialty coffees with low quality beans using rare earth and potentially toxic elements determined by ICP-MS and to evaluate the performance of One-Class Classification methodologies (SIMCA, DD-SIMCA, OCPLS). Thus, 50 samples of special Arabica coffee (grains in natura) were donated by local producers. Of these samples, 6 were adulterated with low quality coffee in the proportion of 25 to 75% m/m. Eighteen rare earth elements and 4 potentially toxic elements were determined by inductively coupled plasma mass spectrometry (ICP-MS) after acidic decomposition of the samples. The SIMCA, DD-SIMCA and OCPLS models were constructed from preprocessed element concentration data using autoscaling (SIMCA and DD-SIMCA) and optrescale for OCPLS. The OCPLS model had the highest correct classification rate (SEN = 94.2% for training set; SEN = 100% and SPE = 94.4% for test set prediction). As the modeling of a class is based only on samples of the target class for model building, unknown samples can be used in future predictions. Therefore, this work contributes to the improvement of methodologies that can be used in authentication processes.

ORGANIZAÇÃO E REALIZAÇÃO:



APOIO:

