

MODELOS PARA PREVISÃO DE NOTAS DE AVALIAÇÃO SENSORIAL DE BEBIDA DE CAFÉ ARÁBICA COM BASE NA COMPOSIÇÃO DO AROMA DO GRÃO TORRADO¹

Juliano Souza Ribeiro²; Terezinha de Jesus Garcia Salva³, Fábio Augusto⁴ e Márcia Miguel Castro Ferreira⁵

¹ Trabalho financiado pela Capes, FAPESP, FINEP e CNPq/caf 

² M.Sc., Instituto Agron mico de Campinas –SP e Unicamp, jribeiro@iqm.unicamp.br

³ Pesquisador, Dr., Instituto Agron mico de Campinas –SP, tsalva@iac.sp.gov.br

⁴ Prof. Titular do Instituto de Qu mica – Unicamp – SP, augusto@iqm.unicamp.br

⁵ Prof. Titular do Instituto de Qu mica - Unicamp – SP, marcia@iqm.unicamp.br

RESUMO: O objetivo desse trabalho foi estabelecer modelos de regress o para previs o de notas de 6 atributos sensoriais com base no perfil cromatogr fico dos vol teis de gr os de caf  ar bica torrado. Cinquenta e tr s amostras de caf s ar bicas torrados foram analisadas sensorialmente usando uma escala de 1 a 5. A extra o dos vol teis foi realizada pela t cnica de microextra o em fase s lida (SPME) e os vol teis extra dos foram analisados por cromatografia gasosa com detector por ioniza o em chama (SPME-GC-FID). A regress o por quadrados m nimos parciais (PLS) e o algoritmo OPS, para a sele o de vari veis, foram as ferramentas empregadas na an lise dos dados. As notas previstas pelos modelos gerados para acidez, amargor, aroma, bebida (sabor), corpo e qualidade global, foram bastante concordantes com as das an lises sensoriais, apresentando erros m dios de previs o iguais a 0,28, 0,33, 0,35, 0,33, 0,34 e 0,41, respectivamente.

Palavras-chave: Microextra o em fase s lida, cromatografia gasosa, caf  ar bica e quimiometria.

PREDICTION MODELS FOR SENSORY EVALUATION OF ARABICA COFFEE BEVERAGES BASED ON THE FLAVOR COMPOSITION OF ROASTED BEANS

ABSTRACT: The aim of this work was to build regression models to preview six sensory attribute scores based on the chromatographic profiles of volatiles of the Arabica roasted beans. Fifty three Arabica roasted coffee samples were tasted using a five point scale. The volatile compounds extraction was carried out using solid phase microextraction technique (SPME) and the extracted volatiles were analysed by gas chromatography using flame ionization detector (SPME-GC-FID). The partial least squares regression (PLS) and the OPS algorithm, for variables selection, were used in the data analysis. The previewed scores agreed very well with the sensory results, presenting mean square errors 0,28, 0,33, 0,35, 0,33, 0,34 and 0,41 for acidity, flavor, overall quality, bitterness, body and cleanliness, respectively.

Key-words: Solid phase microextraction, gas chromatography, Arabica coffee and chemometrics.

INTRODU O

A procura pela qualidade na ind stria de alimentos tem se tornado crescente nas  ltimas d cadas, em vista de exig ncias dos consumidores, que se disp em a pagar mais por alimentos com alguns atributos desejados, invariavelmente com valor agregado. Deste modo,   altamente desej vel o estabelecimento de mecanismos que permitam avaliar, assegurar e certificar a qualidade dos produtos para a manuten o da competitividade comercial. Paralelamente a essa necessidade, cresce o n mero de normas criadas por organismos internacionais para normatizar crit rios de avalia o e padr es de identidade e qualidade de produtos em lan amento ou mesmo h  tempos dispon veis no mercado.

No Brasil, a legisla o vigente em 2009 determina que a avalia o da qualidade da bebida de caf , seja feita pela “prova de x cara” (<http://www.agricultura.gov.br>). Nas pesquisas cient ficas, tem-se procurado, por outro lado, correlacionar os resultados dessa an lise com diferentes caracter sticas f sicas, qu micas e f sico-qu micas dos gr os de caf  crus ou torrados, bem como da bebida propriamente dita. Com esse intuito tem-se investigado, por exemplo, a rela o entre a qualidade da bebida e o pH (Sivetz, 1972), e a acidez total titul vel (De Carvalho et al., 1994), e a atividade de polifenoloxidase (Leite & Carvalho, 1994), e o teor de s lidos sol veis (Vree & Yeransia, 1973), de  cidos clorog nicos (De Maria, 2004; Bicchi et al., 1995; Perrone et al., 2008; Farah et al., 2006), de a  ares, de caf e na, de trigonelina (De Maria et al., 1994; Beckers, 2004; Alves et al., 2006; Morgano et al., 2007), de metais (Fernandes et al., 2005) entre outros (Esteban-D  ez et al., 2004; Franca et al., 2005; Nebesny & Budryn, 2006; Ross et al., 2006; Andr  ez et al., 2007).

As an lises multivariadas t m comprovado uma estreita rela o entre o aroma e a qualidade de produtos aliment cios e agr colas, sendo uma  tima ferramenta para o controle de qualidade de ch s (Togari et al., 1995), vinhos (Rapp, 1998; Aznar et al., 2003), sucos (Reid et al., 2004) e vinagres (Durante et al., 2006). Existem tamb m estudos

recentes que visam correlacionar a bebida de café com o seu aroma, tais como os desenvolvidos por Sanz et al. (2002), Agresti et al. (2008), Toci & Farah (2008), Ribeiro et al. (2009) e Bicchi et al. (1997).

O objetivo deste trabalho foi a construção de modelos de regressão (PLS) para a previsão de nota de atributos da qualidade da bebida de cafés arábica a partir da correlação entre os compostos voláteis que compõem o aroma do café torrado e as notas conferidas pela “prova de xícara”.

MATERIAL E MÉTODOS

Cinquenta e três amostras de café arábica cru de diferentes origens, algumas com defeitos visíveis e, outras não, foram utilizadas no estudo. Para o processo de torrefação, 300 g de cada amostra foram submetidos à torra média (Agtron # 55) em um torrador rotatório a gás (Pinhalense S/A Máquinas Agrícolas). Os grãos torrados foram moídos em moinho elétrico, e, para evitar a perda de constituintes voláteis, as amostras foram armazenadas em embalagens metalizadas (alumínio) recobertas por camadas plásticas (polietileno e poliestireno), seladas (para evitar perda de compostos voláteis e contaminantes externos) e mantidas a -5 °C até sua análise cromatográfica. O intervalo de tempo entre a torra e as análises cromatográficas das amostras foi de 4 horas, no máximo.

Três lotes de café cru, um de 30, um de dez e um de 11 amostras, foram enviados para 3 equipes distintas de 5 provadores para a “prova de xícara”. Para as análises sensoriais as amostras foram torradas e degustadas de acordo com a Instrução Normativa nº 8 de 11/06/2003 (<http://www.agricultura.gov.br>). Uma escala de 1 a 5 foi empregada na atribuição de notas aos diferentes atributos avaliados (Tabela 1).

Tabela 1 - Escala empregada na avaliação da qualidade sensorial de da bebida de café arábica

Notas	Acidez	Amargor	Aroma	Corpo	Bebida (Sabor)	Qualidade global
1	Muito Baixa/indesejável	Forte	Muito fraco/indesejável	Muito Fraco	Rio	Muito ruim
1.5	-	-	Muito fraco/fraco	Muito fraco/fraco	Rio/Riada	Muito ruim/ruim
2	Baixa/indesejável	Forte/reg.	Fraco	Fraco	Riada	Ruim
2.5	-	-	Fraco/reg.	Regular	Dura -	Ruim/reg.
3	Média	Regular	Regular	Regular	Dura	Regular
3.5	-	-	Reg./bom	Reg./bom	Dura +	Reg./bom
4	Méd./Alta	Reg./normal	Bom	Bom	Apenas mole	Bom
4.5	-	-	Bom/excel.	Bom/excel.	Mole	Bom/excel.
5	Alta	Normal	Excelente	Excelente	Estritamente mole	Excelente

A fibra de SPME comercial recoberta com polidimetilsiloxano/divinilbenzeno (PDMS/DVB) com 65 µm de espessura ($V_f = 0.357 \text{ mm}^3$), empregada nas análises cromatográficas, foi previamente condicionada em cromatógrafo a gás por 12 horas a 240° C. As análises cromatográficas foram efetuadas em cromatógrafo a gás modelo G-6850 series GC system (Agilent, Wilmington, DE), com detecção por ionização em chama (FID) e injetor *split/splitless*. A Coluna cromatográfica utilizada foi a HP-5 (5 % difenilsiloxano e 95 % dimetilsiloxano; 30 m x 0.25 mm x 0.25 µm). Hélio foi utilizado como gás de arraste, a uma vazão de 1 mL.min⁻¹. O injetor foi equipado com um *liner* de diâmetro interno de 0.75 e mantido a 220° C no modo *splitless*. A temperatura do forno foi programada da seguinte maneira: 40 °C → 7 °C / min → 150 °C → 30 °C / min → 260°C. Sob essas condições, não foi observado efeito de memória nas corridas em branco entre as extrações.

Para os procedimentos de extração dos voláteis, 250 mg de café torrado e 2 mL de solução saturada de cloreto de sódio foram colocados em recipientes de vidro (5 mL de volume) com tampas perfuradas para adaptação de septos de silicone (Supelco) e, posteriormente, fechados e agitados com barras magnéticas a 900 rpm.

As condições experimentais utilizadas na extração dos voláteis dos cafés arábica foram as definidas pelo planejamento composto central, descrito por Ribeiro et al. (2008): temperatura do banho (T) 42.5 °C, 10 minutos de tempo de pré-equilíbrio (TPE) e 22 minutos de tempo de extração (TE). Todas as análises foram realizadas em triplicata.

Todos os dados cromatográficos obtidos foram transformados em matrizes **X** (*I* x *J*), considerando cada replicata como uma amostra. O processamento dos dados foi realizado segundo o software Mathlab 6.5 (The MathWorks, Co., Natick, MA, USA) e o pacote computacional PLS_Toolbox (Eigenvector Research, Inc. – PLS_Toolbox version 3.02.) (Wise et al., 2004).

O método empregado para a regressão foi o PLS (quadrados mínimos parciais) (Ferreira et al., 1999). Os dados cromatográficos foram alinhados utilizando o algoritmo COW (Nielsen et al., 1998), normalizados por unidade de comprimento, derivados e auto-escalados (Savitzky & Golay, 1964). Para a seleção das variáveis dos modelos de regressão (PLS), empregou-se o algoritmo OPS (*Ordered Predictors Selection*) (Teófilo et al., 2009).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para a construção dos modelos de regressão foram utilizados tanto os valores médios das notas atribuídas à acidez, ao amargor, ao aroma, à bebida, ao corpo e à qualidade global pelos diferentes grupos de provadores quanto os 159 cromatogramas pré-tratados referentes às 53 amostras de café torrado.

Na formação dos conjuntos de calibração de cada modelo, foram selecionados aleatoriamente 129 cromatogramas, correspondentes a 43 amostras, de forma a cobrir toda a faixa de resposta das análises sensoriais. A validação cruzada (interna) realizada com cada conjunto de calibração (129 replicatas) foi realizada retirando-se aleatoriamente 5 amostras por vez (15 replicatas). Os 30 cromatogramas restantes para cada modelo, correspondentes a 10 amostras, foram utilizados para formar os conjuntos de previsão (calibração externa).

A partir da matriz de dados pré-tratada X_p (159x24701), o algoritmo OPS selecionou 1732 variáveis para a construção do modelo de acidez (A), 1515 para o de amargor (B), 2783 para o de aroma (C), 1902 para o de bebida (D), 2223 para o de corpo (E) e 2179 para o de qualidade global (F). Estas variáveis estão indicadas em linhas verticais na Figura 1.

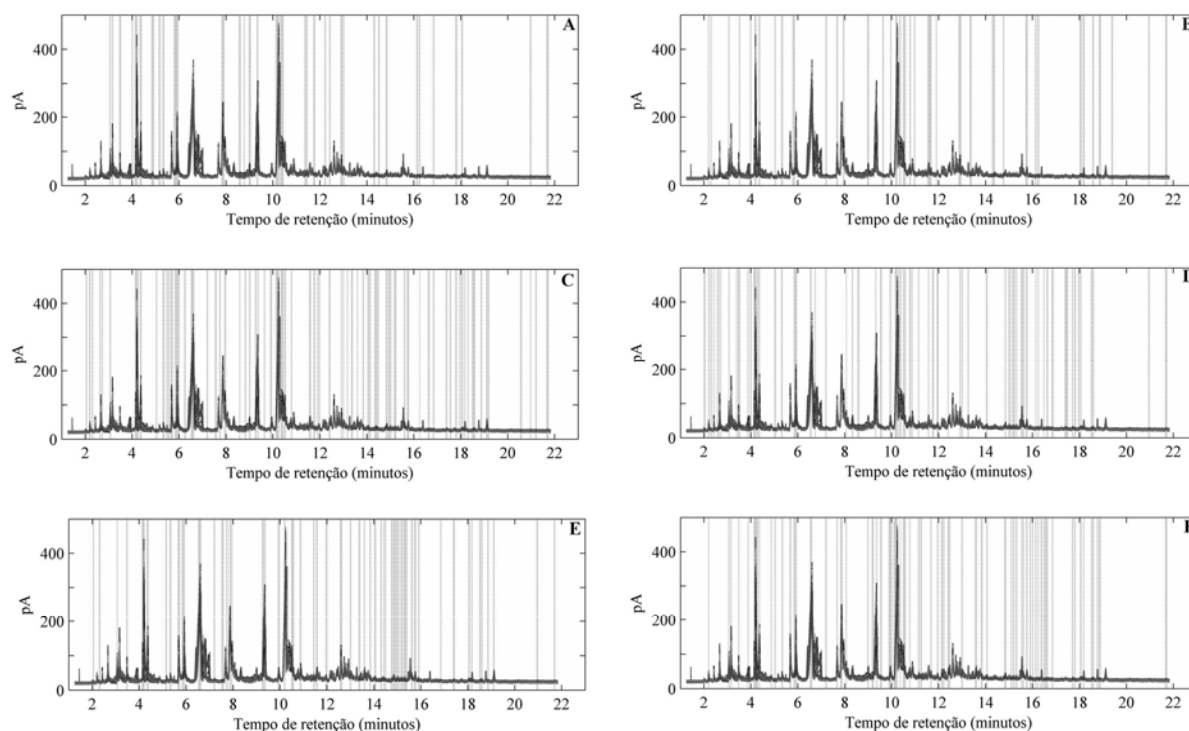


Figura 1 - Cromatogramas sobrepostos dos cafés e os picos selecionados pelo algoritmo OPS para a construção dos modelos de calibração.

O número de variáveis latentes utilizado nos modelos PLS foi determinado a partir dos valores de RMSECV exibidos nos conjuntos de validação cruzada. Esses valores de RMSECV foram atingidos em cada modelo quando se utilizou o número de variáveis latentes indicado na Tabela 2. Nessa tabela são indicados ainda os valores de RMSECV e os coeficientes de correlação da validação cruzada (r_{vc}).

Tabela 2 - Parâmetros estatísticos calculados para os modelos de regressão na validação cruzada.

Modelos	Nº VL	RMSECV	r_{vc}
Acidez	5	$0,27 \pm 0,01$	$0,83 \pm 0,01$
Amargor	4	$0,33 \pm 0,02$	$0,89 \pm 0,02$
Aroma	5	$0,26 \pm 0,01$	$0,95 \pm 0,00$
Bebida	5	$0,36 \pm 0,01$	$0,92 \pm 0,01$
Corpo	4	$0,26 \pm 0,01$	$0,89 \pm 0,01$
Qualidade global	5	$0,38 \pm 0,01$	$0,92 \pm 0,00$

Em média, 95 % e 45 % da variância dos blocos Y e X utilizados nas calibrações foram necessários para descrever cada modelo de regressão.

A Tabela 3 apresenta os valores de referência dos provadores e os valores previstos pelos modelos de regressão para as amostras de previsão. Os valores de RMSEP dos modelos foram 0,28 para a acidez, 0,33 para o amargor 0,33 para o aroma, 0,34 para o corpo, 0,41 para a bebida e 0,35 para a qualidade global.

Tabela 3 - Valores médios e desvios-padrão dos seis atributos sensoriais avaliados pelos provadores e previstos pelos modelos de regressão.

Amostras	Acidez		Amargor		Aroma	
	Medido	Previsto	Medido	Previsto	Medido	Previsto
1	3,00 ± 0,43	2,75 ± 0,16	4,13 ± 0,63	3,38 ± 0,23	2,75 ± 0,29	2,58 ± 0,11
2	3,70 ± 0,39	3,65 ± 0,13	4,38 ± 0,75	4,26 ± 0,12	4,19 ± 0,52	4,09 ± 0,17
3	3,69 ± 0,39	3,40 ± 0,32	4,13 ± 0,63	3,99 ± 0,06	3,63 ± 0,48	3,33 ± 0,11
4	3,38 ± 0,50	3,18 ± 0,11	4,13 ± 0,63	4,30 ± 0,09	3,75 ± 0,29	3,91 ± 0,12
5	2,56 ± 0,43	2,35 ± 0,05	2,69 ± 0,63	2,90 ± 0,10	2,25 ± 0,00	2,53 ± 0,05
6	2,19 ± 0,50	2,13 ± 0,11	3,25 ± 0,50	3,50 ± 0,12	2,63 ± 0,48	2,71 ± 0,11
7	2,91 ± 0,39	2,71 ± 0,06	3,50 ± 0,50	3,57 ± 0,02	4,50 ± 0,48	3,89 ± 0,28
8	3,00 ± 0,25	2,54 ± 0,14	3,50 ± 0,63	3,65 ± 0,06	4,00 ± 0,21	4,05 ± 0,09
9	3,70 ± 0,30	3,38 ± 0,25	4,00 ± 0,75	3,68 ± 0,13	4,50 ± 0,52	4,11 ± 0,14
10	3,00 ± 0,25	3,00 ± 0,08	4,00 ± 0,63	3,61 ± 0,12	4,50 ± 0,65	4,12 ± 0,24

	Bebida		Corpo		Qualidade	
	Medido	Previsto	Medido	Previsto	Medido	Previsto
1	3,83 ± 0,29	3,24 ± 0,18	3,33 ± 0,58	2,79 ± 0,08	3,38 ± 0,48	3,12 ± 0,09
2	4,31 ± 0,38	4,03 ± 0,22	3,44 ± 0,38	3,33 ± 0,08	4,38 ± 0,25	4,26 ± 0,18
3	3,63 ± 0,48	3,36 ± 0,15	3,66 ± 0,58	3,32 ± 0,16	4,13 ± 0,25	3,81 ± 0,25
4	3,88 ± 0,14	3,45 ± 0,25	2,69 ± 0,31	2,71 ± 0,03	4,00 ± 0,00	3,49 ± 0,18
5	1,50 ± 0,20	1,99 ± 0,22	1,94 ± 0,24	2,61 ± 0,05	1,50 ± 0,20	1,91 ± 0,14
6	2,38 ± 0,43	2,37 ± 0,10	2,38 ± 0,43	2,36 ± 0,05	2,19 ± 0,13	2,22 ± 0,10
7	3,75 ± 0,29	3,40 ± 0,13	3,50 ± 0,48	3,12 ± 0,12	3,50 ± 0,41	3,68 ± 0,17
8	4,00 ± 0,31	3,99 ± 0,02	3,50 ± 0,25	3,45 ± 0,23	4,00 ± 0,25	4,03 ± 0,05
9	4,50 ± 0,24	3,88 ± 0,34	4,00 ± 0,50	3,53 ± 0,03	4,50 ± 0,25	3,92 ± 0,12
10	4,50 ± 0,41	4,44 ± 0,22	4,00 ± 0,41	3,85 ± 0,09	4,50 ± 0,50	4,25 ± 0,23

CONCLUSÕES

Os modelos de regressão PLS gerados a partir do perfil cromatográfico dos voláteis de cafés arábica torrado, previram adequadamente as notas de acidez, aroma, qualidade global, amargor, corpo e sabor da bebida. Os erros de previsão desses modelos, empregando 4 ou 5 variáveis latentes, foram iguais a 0,28, 0,33, 0,35, 0,33, 0,34 e 0,41, para cada um dos atributos, respectivamente, e são compatíveis com os erros médios das notas dos provadores.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AGRESTI, P. D. C.; FRANCA, A. S.; OLIVEIRA, L. S.; AUGUSTI, R. Discrimination between defective and non-defective Brazilian coffee beans by their volatile profile. **Food Chem.** 2008, 106, 787-796.
- ALVES, T. S.; DIAS, R. C. E.; BENASSI, M. T. Metodologia para análise simultânea de ácido nicotínico, trigonelina, ácido clorogênico e cafeína em café torrado por cromatografia líquida de alta eficiência. **Quim. Nova** 2006, 29, 1164-1168.
- ANDRUEZA, S.; VILA, M. A.; DE PENA, M. P. Influence of coffee/water ratio on the final quality of espresso coffee. **J. Sci. Food Agric.** 2007, 4, 586-592.
- AZNAR, M.; PEZ, R. L.; CACHO, J.; FERREIRA, V. Prediction of aged red wine aroma properties from aroma chemical composition. Partial least squares regression models. **J. Agric. Food Chem.** 2003, 51, 2700-2707.
- BECKERS, J. L. The determination of caffeine in coffee: Sense or nonsense? **J. Chem. Edu.** 2004, 81, 90-93.
- BICCHI, C. P.; BINELLO, A. E.; PELLEGRINO, G. M. Characterization of green and roasted coffees through the chlorogenic acid fraction by HPLC-UV and principal component analysis **J. Agric. Food Chem.** 1995, 43, 1549-1555.
- BICCHI, C. P.; OMBRETTA, M. P.; PELLEGRINO, G. M.; VANNI, A. C. Characterization of roasted coffee and coffee beverages by solid phase microextraction – gas chromatography and principal component analysis. **J. Agric. Food Chem.** 1997, 45, 4680-4686.
- DE CARVALHO, V. D.; CHAGAS, S. J. D.; CHALFOUN, S. M. Relação entre a composição físico química e química do grão beneficiado e a qualidade da bebida do café. I. Atividades de polifenoloxidase e peroxidase, índice de coloração e acidez. **Pesq. Agropec.Bras.** 1994, 29, 449-454.
- DE MARIA, C. A. B.; MOREIRA, R. F. A Analytical methods for chlorogenic acid. **Quim. Nova** 2004, 27, 586-592.
- DE MARIA, C. A. B.; TRUGO, L. C.; MOREIRA, R. F. A. Composition of green coffee fractions and their contribution to the volatile profile formed during roasting. **Food Chem.** 1994, 50, 141-145.

DURANTE, C.; COCCHI, M.; GRANDE, M. Application of N-PLS to gas chromatographic and sensory data of traditional balsamic vinegars of Modena. **Chemom. Intell. Lab. Syst.** 2006, 83, 54-65.

ESTEBAN-DIEZ, I.; GONZALEZ-SAIZ, J. M.; PIZARRO, C. Prediction of roasting colour and other quality parameters of roasted coffee samples by near infrared spectroscopy. A feasibility study. **J. Near Infrared Spectros.** 2004, 12, 287-297.

FARAH, A.; MONTEIRO, M. C.; CALADO V.; FRANCA, A. S.; TRUGO, L. C. Correlation between cup quality and chemical attributes of Brazilian coffee. **Food Chem.** 2006, 98, 373-380.

FERNANDES, A. P.; SANTOS, M. C.; LEMOS, S. G.; FERREIRA, M. M. C.; NOGUEIRA, A. R. A.; NÓBREGA, J. A. Pattern recognition applied to mineral characterization of Brazilian coffees and sugar-cane spirits. **Spectrochim. Acta Part B** 2005, 60, 717-724.

FERREIRA, M. M. C.; ANTUNES, A. M.; MELGO, M. S., VOLPE, P. L. O. Chemometrics I – Multivariate calibration, a tutorial. **Quim. Nova** 1999, 22, 724-731.

FRANCA, A. S.; MENDONÇA, J. C. F.; OLIVEIRA, S. D. Composition of green and roasted coffees of different cup qualities. **LWT** 2005, 38, 709-715.

LEITE, I. P.; DE CARVALHO, V. D. Influência do local de cultivo e do tipo de colheita nas características físicas, composição química do grão e qualidade do café. **Pesq. Agropec.Bras.** 1994, 29, 299-308.

MORGANO, M. A.; FARIA, C. G.; FERRÃO, M. F.; FERREIRA, M. C. Determinação de açúcares total em café cru por espectroscopia no infravermelho próximo e regressão por mínimos quadrados parciais. **Quim. Nova** 2007, 30, 346-350.

NEBESNY, E.; BUDRYN, G. Evaluation of sensory attributes of coffee brews from robusta coffee roasted under different conditions. **Eur. Food Res. Technol.** 2006, 224, 159-165.

NIELSEN, N. P. V.; CARSTENSEN, J. M.; SMEDSGAARD, J. Aligning of single and multiple wavelength chromatographic profiles for chemometric data analysis correlation optimized warping. **J. Chrom. A.** 1998, 805, 17-35.

PERRONE, D.; FARAH, A.; DONANGELO, C. M.; PAULIS, T.; MARTIN, P. R. Comprehensive analysis of major and minor chlorogenic acids and lactones in economically relevant Brazilian coffee cultivars. **Food Chem.** 2008, 106, 859-867.

RAPP, A. Volatile flavour of wine: Correlation between instrumental analysis and sensory perception. **Nahrung** 1998, 42, 351-363.

REID, L. M.; O'DONNELL, C. P. O.; DOWNEY, G. Potential of SPME-GC and chemometrics to detect adulteration of soft fruit purées. **J. Agric. Food Chem.** 2004, 52, 421-427.

RIBEIRO, J. S.; TEÓFILO, R. F.; AUGUSTO, F.; FERREIRA, M. M. C. Simultaneous multiple response optimization of microextraction conditions using principal component analysis and response surface methodology to coffee volatile extraction, **Resumo completo**. CD-ROM da 22ª ASIC – Campinas-SP, 2008.

RIBEIRO, J. S.; AUGUSTO, F.; SALVA, T. J. G.; THOMAZIELLO, R. A.; FERREIRA, M. M. C. Prediction of sensory properties of Brazilian Arabica roasted coffees by headspace solid phase microextraction-gas chromatography and partial least squares. **Anal. Chim. Acta** 2009, 634, 172-179.

ROSS, C. F.; PECKA, K.; WELLER, K. Effect of storage conditions on the sensory quality of ground Arabica coffee. **J. Food Qual.** 2006, 29, 596-606.

SANZ, C.; MAEZTU, L.; ZAPELENA, M. J.; BELLO, J.; CID, C. Profiles of volatile compounds and sensory analysis of three blend of coffee: influence of different proportions of Arabica and Robusta and influence of roasting coffee with sugar. **J. Sci. Food Agric.** 2002, 82, 840-847.

SAVITZKY, A.; GOLAY, M. J. E. Smoothing + Differentiation of data by Simplified Least Squares Procedures. **Anal. Chem.** 1964, 36, 1627-&.

SIVETZ, M. How acidity affects coffee flavor. **Food Technol.** 1972, 26, 708-&.

TEÓFILO, R. F.; MARTINS, J. P. A.; FERREIRA, M. M. C. Sorting variables by using informative vectors as a strategy for featuring selection in multivariate regression. **J. Chemom.** 2009, 23, 32-41.

TOCI, A. T.; FARAH, A. Volatile compounds as potential defective coffee beans markers. **Food Chem.** 2008, 108, 1133-1141.

TOGARI, N.; KOBAYASHI, A.; AISHIMA, T. Relating sensory properties of tea aroma to gas chromatographic data by chemometric calibration methods. **Food Res. Inter.** 1995, 28, 485-493.

VREE, P. H.; YERANSIA, J. A Determination of soluble solids in roasted coffee. **J. Assoc. Anal. Chem.** 1973, 56, 1126-1129.

WISE, B. M.; GALLAGHER, N. B.; BRO, R.; SHAVER, J. M.; WINDIG, W.; KOCH, R. S. PLS_Toolbox 3.5, for Use with Matlab™, Eigenvector Research. 2004.