

Título em Português:

Desenvolvimento de um sistema optoeletrônico com controle de intensidade luminosa para análise espectral de fluorescência de grãos de café

Título em Inglês:

Development of an optoelectronic system with light intensity control for fluorescence spectral analysis of coffee beans

Autor:

Théo Fonseca Guedes

Instituição:

Universidade de São Paulo

Unidade:

Instituto de Física de São Carlos

Orientador:

Daniel Varela Magalhães

Área de Pesquisa /

Física da Matéria Condensada

SubÁrea:**Agência Financiadora:** USP - Programa Unificado de Bolsas

Desenvolvimento de um sistema optoeletrônico com controle de intensidade luminosa para análise espectral de fluorescência de grãos de café

Théo Fonseca Guedes
Bruno Pereira de Oliveira
Jarbas Caiado Neto
IFSC/USP
theo.fguedes@usp.br

1 Objetivos

Este projeto tem como objetivo desenvolver um método óptico utilizando um espectrofluorímetro baseado em espectroscopia RAMAN para analisar a qualidade dos grãos de café Arabica (*Coffea arabica*) e Conilon (*Coffea canephora*). O objetivo é identificar a composição química e a qualidade dos grãos sem a necessidade de degustá-los [2]. Espera-se que uma análise mais detalhada e confiável observe diferenças nas quantidades de cafeína e açúcar para cada tipo de café, por exemplo. Esses métodos de tratamento permitem uma comparação mais precisa entre os espectros analisados. Esta pesquisa pode desenvolver uma ferramenta útil para verificar a autenticidade de sacas de café no mercado.

2 Materiais e métodos

Técnica RAMAN RAMAN é uma técnica de espectroscopia que tem como base medir a diferença de energia entre fóton emitido e espalhado [1]. O espllhamento é um fenômeno que acontece com menor parte dos fótons incididos (ou

tro processos como reflexão, absorção, etc. ocorrem com mais facilidade), porém marca um impressão digital da molécula, ou das moléculas, por isso é uma boa técnica para análise de substâncias.

Instrumentação: O estudo utilizou um espectrômetro equipado com um laser de 785 nm (Ocean Optics, EUA). O espectrômetro foi acoplado ao software Ocean Optics para aquisição inicial dos dados.

Ferramentas Computacionais: Scripts personalizados desenvolvidos em Fortran e MATLAB foram utilizados para processar os espectros. Esses scripts abordaram especificamente a redução de ruído e a remoção de fluorescência dos espectros RAMAN.

Equipamentos Adicionais: Para garantir a integridade das medições, foi utilizada uma caixa fechada para eliminar a interferência de luz externa. Um suporte de amostras com altura ajustável foi usado para posicionar as amostras de café no ponto focal preciso do laser.

Análise de Amostras Usando Espectroscopia RAMAN: O principal método analítico foi a espectroscopia RAMAN. Amostras de café, tanto verde

quanto torrado, foram analisadas em seu estado natural, sem pré-tratamento. Para cada amostra, os espectros foram coletados ajustando uma variável de cada vez, como a potência do laser ou o tempo de aquisição, mantendo todas as outras condições constantes. Essa abordagem controlada garantiu a confiabilidade dos dados obtidos.

Aquisição dos Espectros: Os espectros foram adquiridos com durações variando de 1 segundo a 1 minuto, dependendo das condições experimentais específicas. A aquisição de dados foi realizada em condições laboratoriais normais, sem controles ambientais adicionais.

Processamento Espectral: Os espectros coletados foram processados para gerar médias e remover a fluorescência e o ruído inerentes. O foco principal foi o deslocamento RAMAN, representado como um gráfico de Intensidade versus RAMAN-shift, que foi derivado da diferença entre as frequências da luz incidente e da luz espalhada.

Consistência: A consistência das medições foi mantida variando sistematicamente apenas um parâmetro experimental de cada vez. Essa abordagem metódica facilitou a compreensão clara de como cada variável influenciava os dados espectrais.

Armazenamento e Formato dos Dados: Todos os dados espectrais processados foram armazenados com segurança em um diretório compartilhado acessível aos colaboradores. Os dados foram salvos em arquivos de texto simples (*.txt), com cada arquivo contendo duas colunas: a primeira para Intensidade e a segunda para RAMAN-shift.

Desafios: Um dos principais desafios encontrados foi a dificuldade em desenvolver um método computacional eficaz para diferenciar a qualidade dos grãos de café com base nos espectros obtidos. Mais pesquisas são necessárias para aprimorar essas técnicas computacionais.

3 Resultados

Os gráficos a seguir já foram tratados por uma rotina no MATLAB para remoção de fluorescência e ruídos.

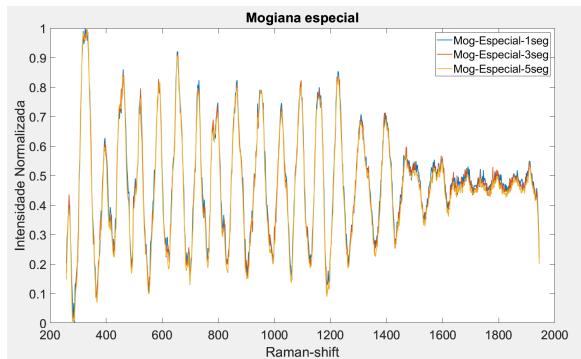


Figura 1: Café especial mogiana com 1, 3 e 5 segundos de aquisição.

Este gráfico mostra como o tempo de aquisição não altera o gráfico em si, principalmente os picos e vale visíveis. Isso porque a fluorescência é o fator que mais se altera pelo tempo de exposição da amostra, e esta foi removida.

Apartir de agora os gráficos serão analisados como média de todos os espectros de cada tipo de amostra, já que o tempo de aquisição não interfere na qualidade do dado.

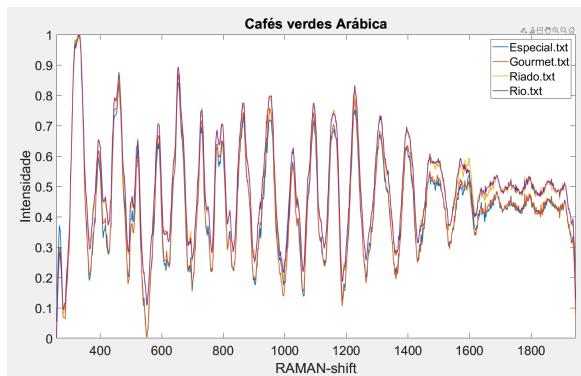


Figura 2: Cafés verdes arabica e conilon.

O figura 2 mostra a diferença nítida de espectro de acordo com a qualidade dele. Os cafés bons, especial e gourmet, a são vistos juntos por todo o espectro, e o mesmo acontece com o rio e riado, cafés de baixa qualidade. Neste gráfico ainda pode

ser visto o conilon neutro, que se destaca por ser de outra espécie, apesar de possuir picos e vales muitos semelhantes aos cafés arabica.

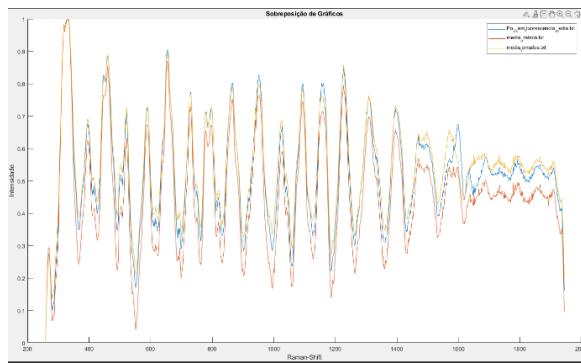


Figura 3: Média dos cafés verdes arabica; café conilon; café torrado arabica.

Já este gráfico compara a média dos cafés torrados de boa qualidade (todos especiais e gourmet) com a média dos café verdes arabica e o café conilon neutro. É possível notar uma grande discrepância entre o conilon e os outros, por ser o único de sua espécie a ser estudado. Além disso, nota-se que um pico deslocado dos torrados em relação aos outros, isso mostra que há uma diferença química entre eles, mesmo sem sabermos qual ainda.

Conclusão

Logo, concluimos que a técnica Raman para análise de qualidade e tipo de

café é um método válido e promissor, já que se prova capaz de demonstrar diferenças a olho nu entre espécies distintas, e até cafés de mesma espécie mas com qualidades diferentes.

Porém, não foi possível concluir a pesquisa de modo a encontrar uma forma de analisar um gráfico para relacionar com alguma espécie, região ou graduação do café, para tal, mostra-se necessário estudos futuros na área.

Uma forte possibilidade é o uso de inteligência artificial, um modelo preliminar se provou eficiente para análise dos espectros já tratados.[3]

4 Agradecimentos

Os autores reconhecem o apoio provido por FAPES grant 2013/07276-1 (CEPOF-CEPID Program), grant 2023/10422-1 (PIPE-FAPESP); grant PUB/USP-1691 and grant PIFS 2023/0063 (EMBRAPII-USP-OPTKAI)

5 Referências

- [1] Derek A. Long, **The Raman Effect: A Unified Treatment of the Theory of Raman Scattering by Molecules**. Bradford, UK: John Wiley Sons, 2002
- [2] L. P. Figueiredo, F. M. Borém, M. R. Almeida, L. F. C. de Oliveira, A. P. C. Alves, C. M. dos Santos, P. A. Rios. **Raman spectroscopy for the differentiation of Arabic coffee genotypes**. Food Chemistry, 288, p. 262-267 (2019)
- [3] Oliveira, Bruno Pereira **Raman Spectral Analysis and Quality: Aided by Artificial intelligence**, 2024



Development of an optoelectronic system with light intensity control for spectral fluorescence analysis of coffee beans

Théo Fonseca Guedes
Bruno Pereira de Oliveira
Jarbas Caiado Neto
IFSC/USP
theo.fguedes@usp.br

1 Objectives

This project aims to develop an optical method using a spectrofluorimeter based on RAMAN spectroscopy to analyze the quality of Arabica (*Coffea arabica*) and Conilon (*Coffea canephora*) coffee beans. The goal is to identify the chemical composition and quality of the beans without the need to taste them [2]. It is expected that a more detailed and reliable analysis will reveal differences in the amounts of caffeine and sugar for each type of coffee, for example. These treatment methods allow for a more precise comparison between the analyzed spectra. This research can develop a useful tool to verify the authenticity of coffee sacks in the market.

2 Materials and Methods

RAMAN Technique: RAMAN is a spectroscopy technique based on measuring the energy difference between emitted and scattered photons [1]. Scattering is a phenomenon that occurs with a smaller portion of incident photons (other processes such as reflection, absorption, etc., occur more easily); however, it marks a

fingerprint of the molecule, or molecules, which is why it is a good technique for substance analysis.

Instrumentation: The study utilized a spectrometer equipped with a 785 nm laser (Ocean Optics, USA). The spectrometer was coupled with Ocean Optics software for initial data acquisition.

Computational Tools: Custom scripts developed in Fortran and MATLAB were used to process the spectra. These scripts specifically addressed noise reduction and fluorescence removal from the RAMAN spectra.

Additional Equipment: To ensure the integrity of the measurements, a closed box was used to eliminate external light interference. An adjustable-height sample holder was employed to position the coffee samples at the precise focal point of the laser.

Sample Analysis Using RAMAN Spectroscopy: The primary analytical method was RAMAN spectroscopy. Coffee samples, both green and roasted, were analyzed in their natural state, without pre-treatment. For each sample, spectra were collected by adjusting one variable at a time, such as laser power or acqui-

sition time, while keeping all other conditions constant. This controlled approach ensured the reliability of the obtained data.

Spectra Acquisition: Spectra were acquired with durations ranging from 1 second to 1 minute, depending on the specific experimental conditions. Data acquisition was performed under normal laboratory conditions, without additional environmental controls.

Spectral Processing: The collected spectra were processed to generate averages and remove inherent fluorescence and noise. The primary focus was on the RAMAN shift, represented as a plot of Intensity versus RAMAN-shift, which was derived from the difference between the frequencies of incident and scattered light.

Consistency: The consistency of the measurements was maintained by systematically varying only one experimental parameter at a time. This methodical approach facilitated a clear understanding of how each variable influenced the spectral data.

Data Storage and Format: All processed spectral data were securely stored in a shared directory accessible to collaborators. The data were saved in plain text (*.txt) files, with each file containing two columns: the first for Intensity and the second for RAMAN-shift.

Challenges: One of the primary challenges encountered was the difficulty in developing an effective computational method to differentiate the quality of coffee beans based on the obtained spectra. Further research is required to improve these computational techniques.

3 Results

The following graphs have already been processed by a MATLAB routine for fluorescence and noise removal.

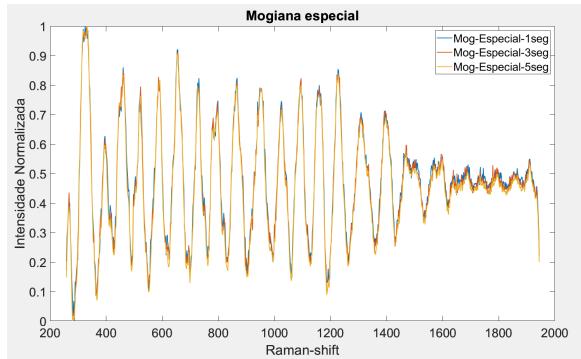


Figure 1: Special Mogiana coffee with 1, 3, and 5 seconds of acquisition.

This graph shows how the acquisition time does not alter the graph itself, especially the visible peaks and valleys. This is because fluorescence is the factor that changes the most with sample exposure time, and this has been removed.

From now on, the graphs will be analyzed as the average of all spectra of each sample type, as the acquisition time does not interfere with the data quality.

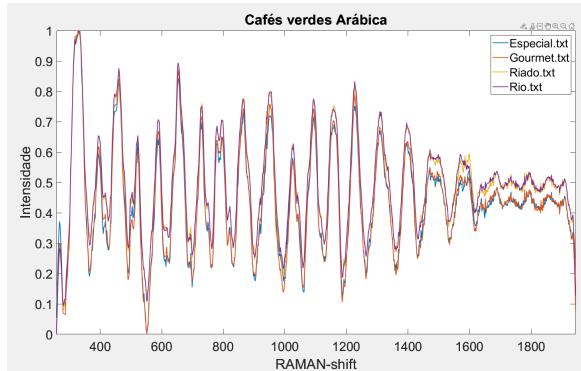


Figure 2: Sample of all green coffees, arabica and conilon neutral.

Figure 2 shows the clear difference in spectrum according to its quality. The good coffees, special and gourmet, are seen together throughout the spectrum, and the same happens with Rio and Riado, low-quality coffees. In this graph, the neutral Conilon can also be seen, standing out for being of a different species, although it has many similar peaks and valleys to Arabica coffees.

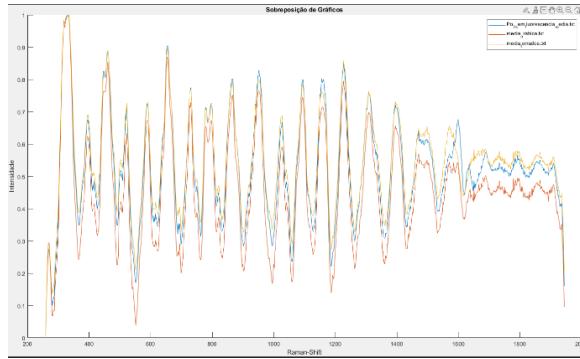


Figure 3: Samples of Arabica green and roasted coffee, and neutral Conilon coffee.

This graph compares the average of high-quality roasted coffees (all special and gourmet) with the average of Arabica green coffees and neutral Conilon coffee. It is possible to notice a significant discrepancy between Conilon and the others, as it is the only species of its kind studied. Additionally, a peak shifted in the roasted coffees compared to the others shows a chemical difference between them, although we still don't know what it is.

Conclusion

Therefore, we conclude that the Raman technique for coffee quality and type analysis is a valid and promising method,

as it proves capable of visually demonstrating differences between different species and even coffees of the same species but with different qualities.

However, it was not possible to conclude the research in a way that allowed us to find a method to analyze a graph to relate it to any specific species, region, or coffee grade. For this, further studies in this area are needed.

A strong possibility is the use of artificial intelligence, as a preliminary model proved efficient in analyzing the already processed spectra [3].

4 Acknowledgments

The authors acknowledge the support provided by FAPES grant 2013/07276-1 (CEPOF-CEPID Program), grant 2023/10422-1 (PIPE-FAPESP); grant PUB/USP-1691, and grant PIFS 2023/0063 (EMBRAPII-USP-OPTKAI).

5 References

- [1] Derek A. Long, **The Raman Effect: A Unified Treatment of the Theory of Raman Scattering by Molecules**. Bradford, UK: John Wiley Sons, 2002
- [2] L. P. Figueiredo, F. M. Borém, M. R. Almeida, L. F. C. de Oliveira, A. P. C. Alves, C. M. dos Santos, P. A. Rios. **Raman spectroscopy for the differentiation of Arabic coffee genotypes**. Food Chemistry, 288, p. 262-267 (2019)
- [3] Oliveira, Bruno Pereira **Raman Spectral Analysis and Quality: Aided by Artificial Intelligence**, 2024