JOSÉ AMÉRICO TRIVELLATO MESSIAS

REDES NEURAIS ARTIFICIAIS: NOVA ABORDAGEM PARA IDENTIFICAÇÃO DA QUALIDADE DA BEBIDA DO CAFÉ ARÁBICA UTILIZANDO-SE RESULTADOS DE ANÁLISES QUÍMICAS

Tese apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Agrícola, para obtenção do título de *Doctor Scientiae*.

VIÇOSA MINAS GERAIS – BRASIL 2009

Ficha catalográfica preparada pela Seção de Catalogação e Classificação da Biblioteca Central da UFV

1

Messias, José Américo Trivellato, 1960-

M585r 2009 Redes neurais artificiais: nova abordagem para identificação da qualidade da bebida do café arábica utilizando-se resultados de análises químicas / José Américo Trivellato Messias.

Viçosa, MG, 2009.
 vii, 76f. : il.; 29cm.

Inclui apêndices.

Orientador: Evandro de Castro Melo.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Viçosa.

Referências bibliográficas: f. 52-58.

- Coffea arabica.
 Café Qualidade.
 Café Classificação.
- Café Análise. 5. Redes neurais (Computação).
- I. Universidade Federal de Viçosa. II. Título.

CDD 22.ed, 663,93

JOSÉ AMÉRICO TRIVELLATO MESSIAS

REDES NEURAIS ARTIFICIAIS: NOVA ABORDAGEM PARA IDENTIFICAÇÃO DA QUALIDADE DA BEBIDA DO CAFÉ ARÁBICA UTILIZANDO-SE RESULTADOS DE ANÁLISES QUÍMICAS

Tese apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Agrícola, para obtenção do título de *Doctor Scientiae*.

APROVADA: 7 de dezembro de 2009.

(Coorientador)

Prof. Jagir Nogrieira da Silva

Prof. Paulo Marcos de Barros Monteiro

Prof. Evandro de Castro Melo (Orientador)

Aos meus pais, Marcus (*in memoriam*) e Maria Ignês, à minha filha, Aline, esposa, Maria Cristina, e aos irmãos, Marcus, Ana e Helena, que sempre me acolheram com carinho e amor, dedico.

AGRADECIMENTOS

Ao término deste trabalho, gostaria de registrar meu agradecimento a todos que auxiliaram, direta ou indiretamente, durante sua realização.

Ao Departamento de Computação (DECOM) do Instituto de Ciências Exatas e Biológicas da Universidade Federal de Ouro Preto, por ter me liberado para fazer este curso.

À Universidade Federal de Viçosa, por intermédio do Departamento de Engenharia Agrícola, pela acolhida.

A CAPES, pelo apoio financeiro.

Aos amigos e colegas da pós-graduação Paulo Pinto, Daniela, José Eduardo, André, Mauro, Rony, Cristiano, Juliana, Rafael, Paulo Coradi, Silvia, Fernando, Ana Paula, Ernandes e José Vitor, pelo companheirismo e auxílio. Aos demais colegas, pelo convívio e amizade ao longo desses anos de estudos.

Aos meus conselheiros, professores Adílio Flauzino de Lacerda Filho, José Helvécio Martins, José Luis Braga e Paulo Roberto Cecon, pelo estímulo, acompanhamento e sugestões.

Ao professor Paulo Marcos de Barros Monteiro, pelo incentivo, apoio e amizade, sem os quais este trabalho não poderia ser realizado.

Ao professor Flávio Meira Borém, pelo apoio e compreensão.

Ao professor Evandro de Castro Melo, pela orientação, com paciência, empenho e amizade.

A Deus, sempre presente.

BIOGRAFIA

José Américo Trivellato Messias, filho de Marcos Lanna Messias e Maria Ignês Trivellato Messias, nasceu em Ponte Nova, MG, em 28 de abril de 1960. Graduou-se em Engenharia Civil na Universidade Federal de Viçosa. Mestre em Ciências da Computação pela Universidade Federal de Minas Gerais em 1994, concluiu, em dezembro de 2009, o doutorado em Engenharia Agrícola na Universidade Federal de Viçosa.

Profissionalmente, é professor do Departamento de Computação do Instituto de Ciências Exatas e Biológicas da Universidade Federal de Ouro Preto, desde 1989.

ÍNDICE

RESUMO	V
ABSTRACT	vi
1. INTRODUÇÃO	1
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	
2.1. Rede Neural Artificial	
2.2. Qualidade do Café	10
2.2.1. Classificação	
2.2.2. Composição Química e Qualidade	13
3. MATERIAL E MÉTODOS	20
3.1. Dados Experimentais	20
3.2. Análise Estatística	
3.3. Rede Neural Artificial	
3.4. Análise dos Dados	25
4. RESULTADOS E DISCUSSÕES	26
4.1. Regressão linear múltipla versus Rede Neural Artificial	
4.1.1. Equação polinomial	31
4.1.2. Equação polinomial com interferência de ε	31
4.1.3. Equação polinomial com interferência de 2 ε	32
4.1.4. Equação Mista	
4.1.5. Equação Mista com interferência de ε	
4.1.6. Equação Mista com interferência de 2 ε	
4.2. Regressão Linear Simples	
4.2.1. Açúcar Redutor	
4.2.2. Açúcar não Redutor	
4.2.3. Acidez Titulável Total	
4.2.5. Lixiviação de Potássio	
4.2.6. Polifenóis	
4.3. Análise Sensorial em Função dos resultados de Acidez Titulá	
Total, Condutividade Elétrica e Lixiviação de Potássio	
4.4. Análise Sensorial em Função de Todas as Análises Químicas	
4.5. Teste da Rede Neural Utilizando Dados de Campo	
4.6. Discussão dos resultados	51
5. CONCLUSÃO	53
6. TRABALHOS FUTUROS	53
7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	54
ADÊNDICE	61

RESUMO

MESSIAS, José Américo Trivellato, D. Sc., Universidade Federal de Viçosa, dezembro de 2009. Redes neurais artificiais: Nova abordagem para identificação da qualidade da bebida do Café Arábica utilizando-se resultados de análises químicas. Orientador: Evandro de Castro Melo. Coorientadores: Adílio Flauzino de Lacerda Filho, José Helvecio Martins, José Luis Braga e Paulo Roberto Cecon.

Este trabalho foi realizado com o objetivo de avaliar a utilização de rede neural artificial para correlacionar os valores resultantes da análise sensorial com os das análises químicas de amostras de café, com vistas à classificação da bebida de café. As amostras de café utilizadas são referentes ao café Coffea arabica L., cultivares Acaiá do Cerrado. Topázio, Catuaí vermelho 99, Acaiá 474-19 e Bourbon, coletadas na região Sul do Estado de Minas Gerais, com processamento pós-colheita controlado. As análises químicas utilizadas foram de açúcar não redutor, açúcar redutor, acidez titulável total, condutividade elétrica, lixiviação de potássio e polifenóis. A qualidade da bebida do café foi avaliada pela análise sensorial. A regressão linear múltipla dos valores de análise sensorial em função dos valores das análises químicas teve coeficiente de determinação igual a 0,6681, enquanto o método de rede neural artificial empregado obteve um nível de acerto na classificação dos valores da análise sensorial em torno de 85%. A rede neural artificial obtida foi testada com amostras de café coletadas em propriedades da mesma região, com processamento pós-colheita sem controle, obtendo acerto de 75% na classificação da bebida. O resultado obtido é indicador de que o método de rede neural artificial é uma ferramenta adequada para correlacionar os valores resultantes da análise sensorial com os das análises químicas.

ABSTRACT

MESSIAS, José Américo Trivellato, D. Sc., Universidade Federal de Viçosa, December of 2009. Artificial neural network: new approach for identification of the quality of drinking Coffee Arabic using chemical analysis results. Adviser: Evandro de Castro Melo. Coadvisers: Adílio Flauzino de Lacerda Filho, José Helvecio Martins, José Luis Braga and Paulo Roberto Cecon.

The present study was performed with the objective of evaluating the utilization of an artificial neural network to correlate results from sensorial analysis with the chemical analysis of coffee samples. The coffee samples utilized belonged to the coffee plant Coffea arabica L., cultivars Acaiá do Cerrado, Topázio, Catuaí vermelho 99, Acaiá 474-19 and Bourbon, collected in the southern region of Minas Gerais State, Brazil, with controlled post-harvest processing. Performed chemical analyses were those of non-reducing sugars, reducing sugars, total titratable acidity, electrical conductivity, leaching of potassium and polyphenols. Coffee quality was evaluated by the sensorial analysis. The multiple linear regression fits of the experimental data from sensorial analysis as a function of the data from the chemical analysis presented a determination coefficient of 0.6681, while the employed artificial neural network reached a classification success rate of, approximately, 85% for the values of sensorial analysis. The artificial neural network obtained was tested with coffee samples collected from properties in the same region, with uncontrolled postharvest processing, reaching a 75% success rate for drink classification. The obtained result is an indicator that the artificial neural network is a suitable tool to correlate results from sensorial analysis with the chemical analysis.

1. INTRODUÇÃO

A qualidade do café está relacionada a diversos constituintes físicos e químicos que determinam o aspecto dos grãos, o aroma e sabor da bebida. Segundo Goulart et al. (2003), a constituição química do grão do café interfere diretamente na qualidade da bebida, destacando-se os seguintes constituintes: aminoácidos, proteínas, cafeína, triglicerídios, açúcares, dextrina, pentosanas, galactomananas, celulose, ácido cafeico, ácido clorogênico e minerais. A dificuldade na definição de um protocolo de determinação laboratorial para a qualidade do café decorre da complexidade da composição química dos grãos. A qualidade da bebida é de suma importância, pois dela depende o valor de comercialização do café, podendo, inclusive, ser fator determinante de exclusão do mercado por não apresentar padrão mínimo de comercialização.

O estudo de processos que visam à determinação dos fatores que interferem na qualidade da bebida do café é foco de inúmeros trabalhos acadêmicos, que estabelecem várias características que interferem direta e indiretamente na determinação dessa qualidade. A análise dessas variáveis é feita, tradicionalmente, com a utilização de ferramentas estatísticas, que têm o foco na obtenção de um modelo que explique a variação das características. Porém, essas ferramentas normalmente não fornecem um modelo que explique a correlação entre as características e classificação da bebida de forma eficiente, tornando-se necessário o estudo de modelos mais eficazes.

A rede neural artificial é ferramenta computacional que provê um modelo que, a partir dos valores de entrada, permite obter valores de saída. O uso da rede neural artificial neste trabalho se deve às suas características de modelagem, sendo possível a criação e reconhecimento de classes de objetos em função de suas características. Os ambientes de programação de rede neural artificial permitem sua adequação ao caso em estudo e a modificação de sua estrutura, tendo em vista o aumento de sua eficiência. O objeto de rede, equivalente a

uma função matemática, é obtido com o treinamento da rede com a utilização de um conjunto de dados de entrada, em que se conhecem os valores de saída. Posteriormente, esse objeto de rede gerado pode ser utilizado para obter o valor de saída, em que se conhecem os valores de entrada e não o valor de saída. A utilização da rede neural artificial contempla a solução do problema em estudo, qual seja estabelecer um método que determina a correspondência entre as variações dos valores da análise sensorial e as variações dos valores das análises químicas.

O objetivo deste trabalho foi verificar o desempenho obtido do método de neural artificial no estabelecimento da correlação entre os valores da análise sensorial e os das análises químicas, em comparação com o resultado obtido por meio da análise de regressão linear. Além disso, foi realizado o estudo do comportamento do método de rede neural artificial com a utilização de amostras de cafés diferentes das amostras que deram origem aos dados utilizados no treinamento da rede.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. Rede Neural Artificial

Uma rede neural artificial é um processador fortemente paralelo e distribuído, constituído de unidades de processamento simples que têm a propensão natural para armazenar conhecimento experimental e torná-lo disponível para uso (HAYKIN, 2000). Ela se assemelha ao cérebro humano em dois aspectos:

- O conhecimento é adquirido pela rede a partir de seu ambiente, por meio de um processo de aprendizagem.
- As forças de conexão entre neurônios, conhecidas como pesos sinápticos, são utilizadas para armazenar o conhecimento adquirido.

O funcionamento de uma rede neural artificial tenta simular o funcionamento de uma rede neural humana. Na Figura 2.1, ilustra-se o neurônio, célula do sistema nervoso humano responsável pela condução do impulso nervoso.

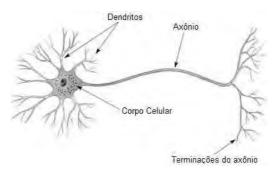


Figura 2.1 - Neurônio humano.

O neurônio é construído de soma (corpo), dendrito e axônio. O dendrito é a conexão entre dois neurônios vizinhos, segundo as formações que fazem o contato entre essas células, para que se propague o impulso. Os sinais são transportados de um neurônio para outro, por meio das sinapses, por uma variedade de substâncias químicas, chamadas de neurotransmissores.

A rede neural biológica é constituída por cerca de 10¹¹ neurônios com 10⁴ conexões para cada neurônio. As pessoas nascem com determinadas estruturas neurais, enquanto outras estruturas são estabelecidas por experiência. As funções biológicas dos neurônios são armazenadas neles e nas conexões. Aprender é um processo de estabelecimento de novas conexões ou modificações das existentes.

A Figura 2.2 ilustra o esquema de um neurônio de uma rede neural artificial.

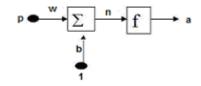


Figura 2.2 - Representação do neurônio artificial.

O valor de saída de cada neurônio pode ser estimado conforme a Figura 2.2, utilizando-se a Equação 2.1 (HAGAN, 2002).

$$a = f(w \times p + b) \tag{2.1}$$

em que:

a = saída;

p = peso sináptico, que é um valor de entrada do neurônio;

w = peso associado ao valor de entrada;

b = tendência¹; e

f = função de transferência.

O peso sináptico (\mathbf{w}) é multiplicado pelo valor de entrada (\mathbf{p}), podendo assumir valores negativos ou positivos. Um combinador linear (Σ) é utilizado para somar os valores de entrada e tendência (\mathbf{b}) do

¹ Tendência, polarização ou inclinação, o que leva a preferir ou privilegiar um elemento em detrimento de outro (bias).

neurônio. A função de ativação (**f**), ou de transferência, é utilizada normalmente para limitar a amplitude da saída.

A Figura 2.3 representa a arquitetura de uma rede neural artificial com quatro camadas, em que ocorrem R valores de entrada, S_i neurônios na camada intermediária i e um neurônio na camada de saída.

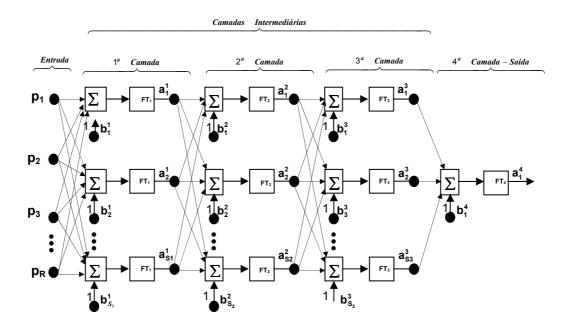


Figura 2.3 - Arquitetura de uma rede neural artificial, em que:

FT_i = função de transferência da cada camada i;

 a_{j}^{i} = valor de saída em que i é o número da camada e j, o número do neurônio:

p_i = valor de entrada sendo i o número da entrada;

bⁱ_j = valor da tendência em que i indica o número da camada e j, o neurônio de destino.

O valor de saída da rede ($\mathbf{a} = a_1^4$) pode ser obtido por meio da Equação 2.2.

$$a = FT_4(W_4.FT_3(W_3.FT_2(W_2.FT_1(W_1.p + b^1) + b^2) + b^3) + b^4)$$
(2.2)

em que:

FT_i = função de transferência ou de ativação de cada camada i;

p = vetor dos valores de entrada da primeira camada;

W_i = matriz de pesos da camada i; e

bⁱ = vetor dos valores de tendência da camada i.

Os parâmetros **p**, **w** e **b** da Equação 2.2 são representados matricialmente, conforme as Equações 2.3, 2.4 e 2.5, respectivamente.

$$p = \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ \vdots \\ p_R \end{bmatrix}$$
 (2.3)

$$\mathbf{w}_{1} = \begin{bmatrix} \mathbf{w}_{11}, \mathbf{w}_{12}, \mathbf{w}_{13}, \cdots \mathbf{w}_{1R} \\ \mathbf{w}_{21}, \mathbf{w}_{22}, \mathbf{w}_{23}, \cdots \mathbf{w}_{2R} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{w}_{S_{1}1}, \mathbf{w}_{S_{1}2}, \mathbf{w}_{S_{1}3}, \cdots \mathbf{w}_{S_{1}R} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{w}_{2} = \begin{bmatrix} \mathbf{w}_{11}, \mathbf{w}_{12}, \mathbf{w}_{13}, \cdots \mathbf{w}_{1S_{1}} \\ \mathbf{w}_{21}, \mathbf{w}_{22}, \mathbf{w}_{23}, \cdots \mathbf{w}_{2S_{1}} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{w}_{S_{2}1}, \mathbf{w}_{S_{2}2}, \mathbf{w}_{S_{2}3}, \cdots \mathbf{w}_{S_{2}S_{1}} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{w}_{3} = \begin{bmatrix} \mathbf{w}_{11}, \mathbf{w}_{12}, \mathbf{w}_{13}, \cdots \mathbf{w}_{1S_{2}} \\ \mathbf{w}_{21}, \mathbf{w}_{22}, \mathbf{w}_{23}, \cdots \mathbf{w}_{2S_{2}} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix}, \quad \mathbf{w}_{4} = \begin{bmatrix} \mathbf{w}_{11}, \mathbf{w}_{12}, \mathbf{w}_{13}, \cdots, \mathbf{w}_{1S_{3}} \end{bmatrix}$$

$$(2.4)$$

$$b_{1} = \begin{bmatrix} b_{1}^{1} \\ b_{2}^{1} \\ b_{3}^{1} \\ \vdots \\ b_{S_{1}}^{1} \end{bmatrix}, \qquad b_{2} = \begin{bmatrix} b_{1}^{2} \\ b_{2}^{2} \\ b_{3}^{2} \\ \vdots \\ b_{S_{2}}^{2} \end{bmatrix}, \qquad b_{3} = \begin{bmatrix} b_{1}^{3} \\ b_{2}^{3} \\ b_{3}^{3} \\ \vdots \\ b_{S_{3}}^{3} \end{bmatrix}, \qquad b_{4} = \begin{bmatrix} b_{4}^{4} \end{bmatrix}$$

$$(2.5)$$

em que:

p_i = valores de entrada em que i representa o número da entrada;

 $w_{j\,i}$ = peso em que j indica o neurônio de destino e i indica a origem do sinal; e

 b_j^i = tendência em que i indica número da camada e j indica o neurônio de destino.

O processo de criação da rede é constituído por três etapas: implementação, treinamento e teste. Na implementação, a rede é descrita de acordo com sua constituição: número de camadas, número de neurônios em cada camada e funções de ativação de cada camada, ou função de transferência (FT). As funções de ativação são do tipo a = f(n).

Por exemplo:

hardlimit(n) =
$$\begin{cases} 0 & \text{se } n < 0 \\ 1 & \text{se } n \ge 0 \end{cases};$$
purelim (n) =
$$\begin{cases} n, & \forall n; \\ 1 + e^{-n}, & \forall n; e \end{cases}$$
tansig (n) =
$$\begin{cases} \frac{e^n - e^{-n}}{e^n + e^{-n}}, & \forall n. \end{cases}$$

Na etapa de treinamento, um primeiro conjunto de dados, de valores de entrada e saída conhecidos, é passado para a rede, e ela é executada, utilizando um algoritmo de aprendizagem até que consiga se ajustar a esses dados. O algoritmo de aprendizagem, ou regras de aprendizagem, é constituído de um conjunto preestabelecido de regras bem definidas para solução de um problema. Existem classes de algoritmos que melhor se enquadram em cada tipo de aplicação.

Na etapa de teste, um segundo conjunto de dados é utilizado pela rede para testar se os valores gerados por ela estão compatíveis com os resultados experimentais. São passados os valores de entrada para a rede gerada no treinamento, que calcula os valores de saída. Então, esses valores são comparados com os valores conhecidos.

Uma variante do processo de desenvolvimento da rede é dividir o conjunto de dados de treinamento em dois subconjuntos: o primeiro é utilizado para o treinamento propriamente dito, enquanto o segundo, para fazer validação durante o processo de treinamento, corrigindo, com isso, distorções.

A propriedade de importância primordial para a rede neural artificial (BRAGA et al., 2000) é sua capacidade de *aprender* (processo de

treinamento da rede) a partir de seu ambiente e de melhorar o seu desempenho por meio da aprendizagem. Uma rede neural artificial aprende acerca do seu ambiente por meio de um processo iterativo de ajustes, aplicados a seus pesos sinápticos e à tendência (*bias*).

Uma rede neural progressiva multicamadas (*feedforward*) consiste em uma rede com várias camadas de neurônios, em que só há ligação no sentido entrada-saída, ligação em sentido único: o grafo formado não contém ciclo. O aprendizado supervisionado é aquele obtido por meio de tutor. O tutor detém o conhecimento do ambiente que a rede neural desconhece. Um conjunto entrada/saída pode representar esse conhecimento.

Um algoritmo de aprendizado com retropropagação (backpropagation) do erro utiliza um aprendizado supervisionado. É passado para a rede neural um conjunto de valores de entrada, em que se verifica a saída da rede, o qual é comparado com o valor esperado, determinando-se o erro. De acordo com o valor do gradiente de erro da última camada, os valores dos pesos sinápticos são ajustados, podendo-se, então, calcular o erro da penúltima camada, e assim por diante, até atingir a primeira camada. Esse processo é, então, repetido até que se tenha o valor do erro menor que a tolerância desejada.

Reconhecimento de padrões é o processo pelo qual um padrão é associado a alguma classe dentro de um número preestabelecido de classes. Primeiramente, a rede neural é submetida ao treinamento com um conjunto de dados com a caracterização das classes. Posteriormente, é apresentado um novo conjunto de dados à rede neural e, então, ela se associa às classes estabelecidas no treinamento.

A rede neural artificial é utilizada, atualmente, nas mais variadas áreas de conhecimento. Esse espectro amplo vem incrementando a sua pesquisa e o seu desenvolvimento. A título de exemplo, podem ser citadas as áreas de:

 Saúde, com o desenvolvimento de sistema de detecção e prevenção de doenças, diagnóstico de câncer de mama

- (MAZUROWSKI et al., 2008), pesquisa de câncer (ODAJIMA et al., 2008), diagnóstico médico (PENG e KING, 2008) e doenças cardiovasculares (GUELI et al., 2005).
- Modelagem ambiental, consumo de água (FIRAT et al., 2009), concentração de poluentes ambientais (CAWLEY et al., 2007; GRIVAS e CHALOULAKOU, 2006), predição de chuva (RAMÍREZ et al., 2004) e determinação das propriedades psicrométricas do ar de secagem (MITTAL e ZHANG, 2003).
- Estatística, função-alvo em problemas de regressão e classificação (CHERKASSKY e MA, 2009; KHOSHGOFTAAR e GAO, 2007), modelo de regressão (HERVÁS-MARTÍNEZ et al., 2008) e comparação de desempenho entre regressão linear múltipla e rede neural artificial (CIURANA et al., 2008; SOUSA et al., 2007; VERLINDEN et al., 2008).
- Agricultura, fertilidade do solo (DU e ZHOU, 2009), produção de enzima (TOKATLI et al., 2009), pesquisa de teor de nitrogênio em plantas (CHEN et al., 2008), detecção de teor de água no solo (LIU et al., 2008), cor do vinho armazenado em diferentes tonéis de madeira (RECAMALES et al., 2007), qualidade de chá (DUTTA et al., 2003), identificação de produtos químicos voláteis com o emprego do "nariz eletrônico" (PARDO et al., 2006; KERMANI et al., 2005; PARDO e SBERVEGLIERI, 2004; CHARUMPORN et al., 2003; TOMINAGA et al., 2001), maturação do café (PINTO et al., 2003) e secagem de plantas medicinais (ERENTUR et al., 2004).
- Controle e automação, controle proporcional-integral-derivativo PID (LU et al., 2009) e controle em tempo real (KORJANI et al., 2009).

A utilização de redes neurais artificiais para a classificação de produtos, utilizando sua composição química, é, atualmente, uma grande área de pesquisa. A "língua eletrônica" e o "nariz eletrônico" são utilizadas por meio de sondas imersas em amostras do produto, a fim de

detectar seus constituintes químicos, que são, então, relacionados à qualidade do produto. Outros trabalhos empregam análises químicas e relacionam seus resultados à qualidade do produto.

Suchacz e Wesolowski (2006) analisaram as concentrações dos elementos zinco, cobre, chumbo e cádmio presentes em medicamentos. Essas concentrações são utilizadas como variáveis de entrada para os modelos de redes neurais e empregadas para reconhecer a taxonomia das plantas que foram utilizadas em sua composição.

Pesquisa desenvolvida por Anderson e Smith (2002) demonstrou a viabilidade de um método para diferenciar as regiões geográficas produtoras de café. Análises elementares de K, Mg, Ca, Na, Al, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Mo, S, Cd, Pb e P das amostras de grãos de café foram utilizadas como entrada de um sistema que utiliza métodos de reconhecimento de padrão estatístico, incluindo a análise de componentes principais, a função discriminante e a análise e modelagem de redes neurais, para a determinação de origem geográfica dos alimentos.

2.2. Qualidade do Café

A qualidade da bebida do café está relacionada a diversos constituintes físicos e químicos, que determinam aspectos dos grãos, o sabor e o aroma da bebida. Segundo Goulart et al. (2003), destacam-se os seguintes constituintes: aminoácidos, proteínas, cafeína, triglicerídios, açúcares, dextrina, pentosanas, galactomananas, celulose, ácido cafeico, ácido clorogênico e minerais. A dificuldade na definição de um protocolo de determinação laboratorial da qualidade do café é proveniente da complexidade da composição química do seu fruto.

2.2.1. Classificação

A classificação da bebida é feita por meio de análise sensorial ou prova de xícara, e conforme a Instrução Normativa Nº 8 (MAPA, 2003), tem a caracterização apresentada segundo a espécie, formato dos grãos,

granulometria, aroma, sabor e cor. O café beneficiado, de acordo com a bebida e com o grupo a que pertence, é classificado em sete subgrupos, como mostrado no Quadro 2.1.

Quadro 2.1 - Café Arábica – café beneficiado grão cru.

Classificação	Características		
Estritamente	Café que apresenta, em conjunto, todos os requisitos		
Mole	de aroma e sabor "mole", porém mais acentuado.		
Mole	Café que apresenta aroma e sabor agradável, brando		
	e adocicado.		
Apenas Mole	Café que apresenta sabor levemente doce e suave,		
	mas sem adstringência ou aspereza de paladar.		
Duro	Café que apresenta sabor acre, adstringente e		
	áspero, porém não apresenta paladares estranhos.		
Riado	Café que apresenta leve sabor típico de iodofórmio.		
Rio	Café que apresenta sabor típico e acentuado de		
	iodofórmio.		
Rio Zona	Café que apresenta aroma e sabor muito acentuado,		
	assemelhado ao iodofórmio ou ao ácido fênico, sendo		
	repugnante ao paladar.		

Fonte: MAPA, 2003.

A classificação da bebida por meio da prova de xícara é subjetiva, pois depende da aptidão do provador e está diretamente relacionada ao seu treinamento, às variedades de cafés com que já se trabalhou e à região de cultivo.

A classificação da bebida para cafés especiais definida pelo método da Associação Americana de Cafés Especiais (SCAA – Specialty Coffee Association of America) é baseada em dez atributos (LINGLE, 2001): fragrância e aroma, uniformidade, defeitos, doçura, sabor, acidez, corpo, finalização, equilíbrio e avaliação final. As notas são estabelecidas a partir

de uma escala que representa níveis de qualidade, como descrito no Quadro 2.2.

Quadro 2.2 - Escala de qualidade da metodologia SCAA

Escala de Qualidade				
Nota	Descrição			
6 a 6,75	Bom			
7 a 7,75	Muito Bom			
8 a 8,75	Excelente			
9 a 9,75	Excepcional			

Fonte: CACCER, 2005.

A faixa de notas entre 2 e 6 é aplicada aos cafés comerciais. O resultado final da classificação, Quadro 2.3, é obtido pela soma dos resultados individuais, subtraindo-se os defeitos.

Quadro 2.3 - Escala de qualidade final da metodologia da SCAA

Descrição Especial	Classificação
Exemplar	Super Prêmio de Especialidade
Excepcional	Prêmio de Especialidade
Excelente	Especialidade
Muito Bom	Especial
Bom	Qualidade Boa Normal
Fraco	Qualidade Média
	Nota Exchange
	Comercial
	Nota Baixa
	Sem Nota
	Exemplar Excepcional Excelente Muito Bom Bom

Fonte: CACCER, 2005.

O método da Associação Brasileira de Cafés Especiais (BSCA – Brazil Specialty Coffee Association) baseia-se em uma classificação em que a nota atribuída varia de 0 a 8 (ISQUIERDO, 2008). Os atributos avaliados são: corpo, aroma, acidez, doçura, balanço, bebida limpa e sabor característico. Como são oito atributos, e a nota máxima é oito para cada um, a nota máxima total seria 64. Porém, é somado o valor 36 ao total da nota. Dessa forma, a nota total poderá atingir o valor total 100.

2.2.2. Composição Química e Qualidade

O desenvolvimento de pesquisa envolvendo a qualidade da bebida do café é uma prática antiga. No trabalho de Garruti et al. (1968), foi feito um estudo para verificação da quantidade de mistura de café com qualidade dos tipos rio e mole para determinação de bebida com qualidade riado, sendo a qualidade da bebida determinada por avaliação sensorial. A análise dos resultados foi realizada por meio de regressão linear, apresentando como conclusão que a mistura de 10% de café tipo rio e 90% de café tipo mole foi a que teve resultado mais próximo da classificação riado.

A preocupação com a influência dos componentes químicos do café também foi objeto de pesquisa de Sabbagh et al. (1977), que analisaram os teores e tipos de açúcares do café torrado. Nesse estudo, observaram que a sacarose foi o açúcar predominante no café arábica, enquanto os açúcares redutores predominaram no café robusta verde.

Ao analisar o procedimento de secagem, Borém et al. (2008) observaram que, quando a temperatura utilizada for inferior a 40 °C, a membrana celular do grão de café é preservada; quando for utilizada a temperatura de 50 °C, há uma desorganização da membrana com perda da qualidade da bebida do café e, quando for utilizada a temperatura de 60 °C, há a ruptura das vesículas da membrana celular, causando oclusão dos espaços intercelulares. Nesse caso, a perda de qualidade é maior. Esse resultado pode ser observado, de forma indireta, em experimentos de secagem, em que há aumento da condutividade elétrica e lixiviação de

potássio, devido à ruptura da membrana e extravasamento do conteúdo celular.

Na avaliação físico-química e de qualidade do café (*Coffea arabica* L.) submetido a diferentes tempos de espera para secagem, Pimenta et al. (2008) utilizaram as análises, entre outras, de acidez titulável total, lixiviação de potássio e prova de xícara. Nos cafés de pior qualidade, observaram que a acidez titulável total e a lixiviação de potássio tinham maiores valores.

Para estudar o efeito das condições de secagem e armazenamento sobre a qualidade do café natural e despolpado, Coradi et al. (2007) trabalharam com as análises de condutividade elétrica, lixiviação de potássio, acidez titulável total, açúcares totais e redutores e análise sensorial da bebida pelo método da BSCA.

Para avaliar o potencial da região Sul de Minas Gerais para a produção de cafés especiais, Chagas et al. (2005) utilizaram as análises de condutividade elétrica, lixiviação de potássio e de polifenoloxidase. A qualidade da bebida foi estabelecida, de forma indireta, pelos valores resultantes dessas análises guímicas. Α menor atividade polifenoloxidase indicou menor índice de danos aos consequentemente podendo-se obter melhor bebida. O menor valor de condutividade elétrica e de lixiviação de potássio indicou que as membranas celulares sofreram menos danos, o que pode possibilitar obter melhor qualidade da bebida.

Na verificação da influência da secagem, em diferentes tipos de terreiro, sobre a qualidade do café durante o armazenamento, Reinato et al. (2007) utilizaram as análises de condutividade elétrica, lixiviação de íons de potássio, açúcares totais e prova de xícara. Os maiores valores de condutividade elétrica e de lixiviação de potássio do café secado em camada espessa ou quando secado em camada fina, mas em terreiro de terra, foram associados à redução na qualidade da bebida do café. Foi observado, também, diminuição dos valores de açúcar total nos cafés secados em camada espessa, o que proporcionou melhores condições

para o desenvolvimento de microrganismos que utilizam os açúcares como um dos principais substratos para o seu desenvolvimento.

Na determinação da qualidade do café submetido a diferentes temperaturas, fluxo de ar e períodos de pré-secagem, Borém et al. (2006) utilizaram a análise sensorial e as análises químicas de condutividade elétrica, lixiviação de potássio, açúcares totais e redutores. Os menores valores de condutividade elétrica e de lixiviação de potássio e os maiores valores de açúcares totais e redutores foram indicadores de melhor qualidade da bebida. Os testes de condutividade elétrica e lixiviação de potássio foram indicadores da integridade das membranas celulares e os açúcares, os precursores do sabor e aroma do café torrado.

Com o objetivo de avaliarem cultivares com resistência à ferrugem, Mendonça et al. (2007) utilizaram análises de composição química e físico-química dos grãos crus de café. Foram empregadas as análises de polifenóis, açúcares totais, redutores e não-redutores. Observaram-se diferenças na composição química dos grãos crus e, dessa forma, concluíram ser possível inferir que existe influência do genótipo sobre essas características.

Malta et al. (2005), analisando os fatores que afetam a determinação da condutividade elétrica e lixiviação de potássio na determinação da qualidade da bebida do café, concluíram que a presença de grãos defeituosos influencia os valores de condutividade elétrica e lixiviação de potássio, podendo fornecer interpretações inadequadas quanto à qualidade do café analisado.

Com o objetivo de avaliarem a influência das diferentes operações de pré-processamento, da colheita até o armazenamento, sobre a qualidade do café, Afonso Júnior et al. (2004) utilizaram a análise de condutividade elétrica como indicador de qualidade. Foi observado elevação dos valores de condutividade elétrica com o prolongamento do tempo de armazenamento, indicando perda de qualidade do café e tendência para a perda da integridade das membranas celulares durante o armazenamento. O processo de retirada da casca do café contribuiu

para redução dos valores médios de condutividade elétrica dos grãos e, consequentemente, para a obtenção de cafés com qualidade superior. Houve aumento dos valores médios de condutividade elétrica no processo de secagem, sendo mais acentuado para aqueles em que a secagem do café foi realizada mecanicamente. Observou-se, também, que não houve influência significativa do processo de retirada mecânica da mucilagem na alteração dos valores médios de condutividade elétrica dos grãos de café.

O modo de analisar estatisticamente os resultados das análises químicas foi alterado com o passar dos anos. Inicialmente, as análises univariadas eram mais utilizadas. Posteriormente, as análises multivariadas passaram predominar nos trabalhos, principalmente quando o número de variáveis analisadas se torna grande, caso da análise de componentes voláteis.

Os trabalhos discutidos a seguir deram origem aos dados que foram utilizados no método de aplicação da rede neural artificial para correlacionar os resultados de análises químicas e físico-químicas com a qualidade da bebida neste trabalho.

Isquierdo (2008) apresentou uma avaliação dos efeitos de diferentes períodos de repouso durante a secagem e de diferentes teores de água em que a secagem do café cereja desmucilado foi interrompida, tendo influenciado na composição química e qualidade da bebida. Para caracterização da qualidade da bebida, foram realizadas as análises de condutividade elétrica, lixiviação de potássio, açúcares totais, redutores e não-redutores, acidez titulável total, polifenóis, sólidos solúveis totais e análise sensorial. Os dados de secagem e das análises químicas do café foram avaliados utilizando-se o programa *Sisvar 4.0*, sendo as médias comparadas pelo teste de *Tukey*. Os dados da análise sensorial foram analisados utilizando-se técnicas multivariadas. Entre os resultados apresentados, destacam-se a análise sensorial, que não foi afetada pelo período de repouso nem pelos níveis do teor de água quando a secagem foi interrompida; os cafés, que tiveram a secagem interrompida com teor de água de 24% (bu) para posterior secagem até 11% (bu), sofreram

menor lixiviação de potássio e condutividade elétrica, independentemente do período de repouso; e nas demais análises químicas não se observou influência do período de repouso e do teor de água com a interrupção da secagem.

Nobre (2008) propôs um método para o processamento de frutos imaturos de café. Para tanto, foram realizadas as análises de açúcares totais, acúcares redutores e não redutores, acidez titulável total, sólidos solúveis, potássio. condutividade lixiviação de elétrica. clorogênicos, classificação física, sensorial (método da BSCA) e prova de xícara. A análise de variância foi utilizada para analisar as variáveis químicas e físico-químicas e a classificação por defeitos do café. As médias foram comparadas entre si, por meio dos testes de Student e Tukey. Os dados da análise sensorial foram analisados pela análise de agrupamento, utilizando-se o programa Minitab 15. O tipo e a bebida foram avaliados em forma de gráficos de frequência. Como resultado destaca-se que o descascamento do café verde ocasionou melhor qualidade final do café, com melhora de suas características químicas e físico-químicas, além de diminuir o número de defeitos e melhorar a qualidade da bebida na prova de xícara.

Taveira (2008) propôs uma avaliação da qualidade sensorial e fisiológica dos grãos de café processados e secos utilizando diferentes métodos, bem como a identificação de marcadores bioquímicos capazes de diferenciar esses procedimentos pós-colheita. Foram utilizados café cereja maduro e café natural maduro. A análise sensorial da bebida do café foi feita pelo sistema proposto pela SCAA. Foram efetuadas as análises químicas do teor de açúcares, acidez titulável total e compostos fenólicos. Foram feitas, ainda, as análises fisiológicas de lixiviação de potássio, condutividade elétrica, germinação, teste de velocidade de emergência e análise eletroforética de proteínas. Os dados obtidos das análises químicas, sensorial e fisiológicas do café foram submetidos à análise de variância e as médias, comparadas pelo teste de *Scott-Knott*. Com base nos resultados observados, verificou-se que a secagem em

terreiro proporcionou melhor qualidade fisiológica e de bebida dos grãos de café. Observou-se melhor qualidade fisiológica no café despolpado que no natural, independentemente do método de secagem; e que a temperatura de 60 °C não é indicada para a secagem, sendo as temperaturas de 40 °C e 60 °C adequadas para o café despolpado, porém não são indicadas para o café natural.

Fernandes (2008) propôs um estudo sobre a qualidade sanitária, físico-química e sensorial de café. Foram utilizados cafés cereja descascado, cereja e verde, roça e bóia. Foi aplicado, nas folhas e frutos, cloreto de benzalcônico (amônia quaternária), que é um produto sanificante no controle de fungos e combate à ferrugem do cafeeiro. Foram realizadas análises microbiológicas, físico-químicas e sensoriais. As análises físico-químicas realizadas foram de teor de água, condutividade elétrica, lixiviação de íons potássio, sólidos solúveis, acidez total titulável, polifenóis, açúcares redutores, não redutores e totais. A análise estatística foi realizada segundo diferentes métodos, envolvendo análises estatísticas univariadas e multivariadas. A análise dos componentes principais foi utilizada para avaliar os dados referentes à qualidade do café, quanto à ausência e presença de defeitos nos grãos. A análise de correspondência foi utilizada para verificar as amostras mais representativas para cada tipo de café. A análise de variância e o teste de Scott-Knott foram utilizados para interpretação dos cruzamentos dos tipos de colheita e processamento para esclarecimento de ocorrência de fungos. Os dados da análise sensorial foram analisados, utilizando-se técnicas multivariadas. Com os resultados observados, verificou-se que a análise química de cafés com defeitos não discriminou diferenças entre os tipos de colheita e processamento; apenas o uso de sanificante na précolheita ou relacionado a diferentes tipos de colheitas não contribuiu para a melhoria da qualidade dos cafés; o método de processamento cereja descascado permitiu manter a melhor qualidade do café; e cafés com maior quantidade de grãos ardidos tiveram pior qualidade na análise sensorial.

Dois trabalhos estão em andamento: o de Figueiredo (2009) e o de Ribeiro (2009). Figueiredo (2009) utilizando café cereja descascado, desenvolveu um trabalho para descrever o perfil sensorial, químico e proteômico de cultivares de cafeeiro Bourbon (Coffea arabica L.), no Sul do Estado de Minas Gerais, visando à identificação de plantas promissoras para a produção de cafés de qualidade superior. As análises químicas utilizadas foram de condutividade elétrica, lixiviação de potássio, sólidos solúveis, acidez titulável total, açúcares redutores, não redutores e totais, polifenóis e análise sensorial, pelo método da SCAA. Já Ribeiro (2009), utilizando café cereja descascado, desenvolveu um trabalho para utilização de atmosfera artificial fazer análise técnica da armazenamento de cafés especiais. As análises químicas empregadas foram de acidez titulável total, condutividade elétrica, lixiviação de potássio, açúcares totais, redutores e não redutores, compostos fenólicos totais e análise sensorial, pelo método SCAA.

3. MATERIAL E MÉTODOS

Este trabalho foi desenvolvido na Área de Energia do Departamento de Engenharia Agrícola do Centro de Ciências Agrárias da Universidade Federal de Viçosa, em Viçosa, MG.

3.1. Dados Experimentais

Os dados utilizados foram disponibilizados pela equipe do professor Flávio Meira Borém, do Departamento de Engenharia da Universidade Federal de Lavras, em Lavras, MG.

Os dados estão caracterizados nas referências: ISQUIERDO (2008), 30 conjuntos; RIBEIRO (2009), 84 conjuntos; NOBRE (2009), 70 conjuntos; TAVEIRA (2009), 18 conjuntos; FIGUEIREDO (2009), 115 conjuntos; e FERNANDES (2008), 96 conjuntos. No total, são 413 conjuntos de dados a serem utilizados para implementação da Rede Neural Artificial. Esses dados se referem à espécie Coffea arabica L., cultivares Acaiá do Cerrado, cultivar Topázio, cultivar Catuaí Vermelho 99, cultivar Acaiá 474-19 e do grupo Bourbon. Os cafés foram coletados predominantemente na região Sul de Minas Gerais, nos municípios de Lavras, Três Pontas, Santo Antônio do Amparo, Guaxupé e Machado. Os procedimentos de colheita, secagem e armazenamento foram específicos em cada experimento. Cada experimento teve um período de colheita, porém as colheitas foram efetuadas nos últimos cinco anos. As análises foram apropriadas para o objetivo de estudo de cada experimento, porém as análises químicas de açúcar não redutor e açúcar redutor, acidez titulável total, condutividade elétrica, lixiviação de potássio e polifenóis foram comuns a todos. A análise sensorial, método da BSCA ou método da SCAA, também foi comum a todos os experimentos. Essas análises têm seus métodos de determinação descritos nos trabalhos referenciados anteriormente e foram efetuadas em diferentes laboratórios da região.

3.2. Análise Estatística

As análises de regressão linear simples e múltipla foram feitas utilizando o Programa SAEG, versão 9.1 (SAEG, 2007). Os resultados da execução dessas análises estão no Apêndice 1. Primeiro, foi realizada a regressão linear simples dos resultados da análise sensorial, em função dos resultados de cada uma das análises químicas. Em seguida, foi realizada a regressão linear múltipla dos resultados da análise sensorial, em função dos resultados das análises de Acidez Titulável Total, Condutividade Elétrica e Lixiviação de Potássio. Por fim, foi realizada a regressão linear múltipla dos resultados da análise sensorial, em função dos resultados de todas as análises químicas.

3.3. Rede Neural Artificial

A rede neural artificial desenvolvida foi implementada, treinada e testada, utilizando-se o programa MATLAB®, versão 6, *MathWorks Inc.*, com o pacote de ferramentas de redes neurais. Para criar um objeto rede, no MATLAB®, foi utilizado o comando *newff*, que possui o seguinte formato:

 $Rede = newff(MM, TC, \{FA\}, LR)$

Os termos utilizados nesse comando são:

Rede – é uma variável que armazena o objeto de rede neural artificial a ser criada;

MM – matriz Rx2, em que R é o número de entradas (constituintes físico-químicos do café) com maiores e menores valores dos parâmetros;

TC – matriz com o tamanho (número de neurônios) de cada camada;
FA – funções de ativação de cada camada, função responsável pela manipulação dos valores de entrada para obter os valores de saída.
O valor de saída a é obtido aplicando-se a função de transferência à soma da tendência b, bias, ao produto da matriz de peso w pelo vetor dos valores de entrada p, ou seja, a = f (w.p+b); e

LR – regra (algoritmo) de aprendizagem utilizada no treinamento da rede.

O treinamento da rede foi feito com a utilização do comando *train*, que possui o formato:

train (Rede, p, t)

Os parâmetros utilizados nesse comando são:

p – a matriz com a amostra dos vetores de entrada para treinamento, os quais têm que estar em coluna. A matriz possui dimensões R x N. R é a dimensão do vetor de entrada (número de análises químicas utilizadas) e N o número de vetores da amostra (número de conjuntos de resultados das análises químicas); e

T – matriz com os valores corretos da classificação dos N vetores da amostra. A matriz possui dimensão S x N, sendo S é o número de neurônios na saída da rede neural artificial. Foi utilizado um neurônio na camada de saída (S = 1), sendo esse valor de saída associado à classe a que pertence cada conjunto de dados, de acordo com o valor da análise sensorial pertencente.

O teste da rede foi feito com a utilização do comando *sim*, que possui o formato:

saida = sim (Rede, p')

Os termos utilizados nesse comando são:

p' – matriz transposta de p com a amostra dos vetores de teste,
 valores de entrada, constituintes físico-químicos do café; e
 saida – vetor contendo os valores associados à classe da qualidade
 da bebida classificada pela rede.

Os nomes *Rede*, *MM*, *TC*, *p*, *t* e *saida*, utilizados aqui, são variáveis, podendo ser substituídos por qualquer outro nome de variável. *FA* é o nome de uma função de ativação válida para o MATLAB[®]. Da mesma forma, *LR* é o nome do algoritmo de aprendizagem válido para o MATLAB[®], utilizado no treinamento da rede. No desenvolvimento do trabalho, foram testados diferentes algoritmos de aprendizagem e funções de transferência para determinação da rede com melhor desempenho.

A rede neural artificial utilizada foi uma rede progressiva (feedforward) multicamadas, com algoritmo de aprendizado com retropropagação (backpropagation) do erro.

O valor da análise sensorial está compreendido, teoricamente, entre 0 e 100. Para implementação do método, os valores da análise sensorial foram agrupados da seguinte forma: classe 1 para valor maior que 79; classe 2 para valor inferior ou igual a 79 e maior que 74; classe 3 para valor inferior ou igual a 74 e maior que 69; e classe 4 para valor inferior ou igual a 69.

Os 413 conjuntos de dados, composição química e análise sensorial, utilizados para implementar a rede neural artificial, foram divididos, de forma aleatória, em três grupos: um primeiro, utilizado para treinamento da rede (em torno de 80% dos dados); um segundo, para validação durante o treinamento da rede (em torno de 10% dos dados); e um terceiro, para teste da rede gerada (em torno de 10% dos dados). A verificação de desempenho da rede foi feita comparando o resultado esperado, relativo ao terceiro grupo de dados, com o resultado estabelecido pela rede neural artificial. Cada conjunto possui os dados que foram utilizados como entrada da rede neural artificial, resultados da composição química e valores utilizados para comparar com os valores de saída da rede neural artificial, resultados da análise sensorial. A utilização dos resultados da análise sensorial se dá na fase de treinamento para determinação do erro que será utilizado na aferição do treinamento e na fase de teste para determinação do desempenho da rede neural artificial.

Para definição da arquitetura de rede neural artificial a ser utilizada, foi testado o desempenho de várias configurações de rede com uma camada de entrada, uma camada de saída e duas ou três camadas intermediárias. Foi definido que a camada de saída seria constituída de um neurônio e seu valor associado à classe da bebida do café, determinada pelo valor da análise sensorial. As redes com pequeno número de neurônios, de um a quatro neurônios, nas camadas de entrada e intermediárias não apresentaram bom desempenho. Da mesma forma,

as redes com mais de quinze neurônios por camada também não apresentaram desempenho que justificasse sua utilização. As redes com melhores desempenhos, escolhidas para utilização, foram aquelas com número de neurônios nas camadas de entrada e intermediárias com valores entre cinco e treze neurônios por camada.

Foram testadas as funções de ativação *logsig*, *tansig*, *hardlimit* e *purelim* para utilização nas camadas. O melhor desempenho foi obtido com a utilização da função de ativação *purelim* na camada de saída e *logsig* nas demais.

Foram testados os algoritmos de aprendizado: trainlm (Levenberg-Marquardt), trainbfg (BFGS Quasi-Newton), trainrp (Resilient trainscg (Scaled Conjugate Backpropagation), Gradient), traincgb (Conjugate Gradient with Powell/Beale Restarts), traincgf (Fletcher-Powell Conjugate Gradient), traincgp (Polak-Ribiére Conjugate Gradient), trainoss (One-Step Secant) e traingdx (Variable Learning Rate Backpropagation). O algoritmo trainlm foi escolhido por prover melhor controle de utilização de memória e tempo de convergência. A utilização dos demais algoritmos não resultou em melhoria de desempenho que justificasse sua utilização.

O maior número de ciclos (*epocs*) utilizado auxilia na obtenção de um resultado em que a rede neural artificial possa ter menor erro. Inicialmente, o valor do erro reduz mais rapidamente e, com o passar dos ciclos, esse erro tende a estabilizar-se. O aumento do valor do número de ciclos faz que o treinamento da rede gaste mais tempo para terminar. Os valores testados para número de ciclos foram: 100, 200, 300, 500, 1.000, 5.000 e 10.000. Verificou-se que o valor 300 foi mais apropriado para utilização, apresentando erro final adequado e com tempo de processamento reduzido para sua obtenção.

A precisão do erro quadrático médio para critério de parada foi definido para que o treinamento fosse interrompido quando se atingisse o valor do erro dentro da faixa adequada ao método, sem que o número de ciclos fosse atingido. O valor 0,0001 foi o que permitiu definir um erro final que não interferisse na determinação das classes.

Depois que todos os testes iniciais foram efetuados, foi definido um conjunto de parâmetros para utilização na implementação da rede neural artificial para os testes de seu desempenho na definição da qualidade do café, a saber:

- Seis valores de entrada, um de cada variável associada aos valores das análises químicas.
- Duas camadas intermediárias, a primeira com 5, 7 ou 9 neurônios, e a segunda com 5, 7, 9 ou 13 neurônios.
- Camada de saída com um neurônio associado ao valor da análise sensorial
- Função logsig, utilizada como função de ativação das camadas intermediárias e purelin para última camada
- Algoritmo *trainlm*, utilizado como algoritmo de aprendizado;
- o número de ciclos (epocs) utilizados foi 300 para cada execução.
- A precisão do erro quadrático médio para critério de parada foi de 0,0001.
- Foram utilizadas 20 execuções para cada configuração de rede, selecionando a configuração que apresentou melhor desempenho.

3.4. Análise dos Dados

A análise dos dados foi feita com a finalidade de verificar a interferência da variação dos dados relativos aos valores das análises químicas e aos valores da análise sensorial do café. Essas análises foram realizadas por meio da utilização de rede neural artificial e confrontada com a análise de regressão linear.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1. Regressão linear múltipla versus Rede Neural Artificial

Para entendimento dos parâmetros necessários à comparação dos métodos de regressão linear múltipla e rede neural artificial, foi feita, inicialmente, uma simulação teórica com utilização de duas equações, envolvendo seis variáveis independentes e uma dependente. Foram utilizadas seis variáveis independentes porque as análises químicas foram em número de seis e a pretensão era obter um resultado que pudesse ser comparado com o resultado obtido com os dados experimentais.

A primeira equação a ser utilizada, Equação 4.1, é polinomial de grau 1, em que se tem variação simples dos coeficientes. A segunda equação, Equação 4.2, envolve logaritmo na base 10 e polinômio de expoente positivo (+1, +2 e +3), negativo (-1) e fracionário (0,5). O objetivo da utilização dessa segunda equação foi estabelecer um modelo um pouco mais complexo para verificação de desempenho dos dois métodos.

$$Y = 65 + \frac{X_1}{100} - \frac{X_2}{10} + \frac{2 + X_3}{2} - X_4 + \frac{5 X_5}{2} - 7 X_6$$
 (4.1)

Os valores das variáveis independentes foram ajustados para que os valores da variável dependente possam ter comportamento próximo ao da análise sensorial. Os valores de Y variam entre 31 e 92, enquanto os valores da análise sensorial, entre 44 e 82. As variáveis independentes utilizadas nessas equações são hipotéticas e não têm correspondência com as variáveis experimentais.

Valores das variáveis para Equação 4.1:

 $X_1 = (100; 303; 506; 709; 912);$

 $X_2 = (21; 48; 75; 102; 129);$

 $X_3 = (5,0; 7,3; 9,6; 11,9; 14,2);$ $X_4 = (1,9; 3,6; 5,3; 7,0; 8,7);$ $X_5 = (0,7; 1,6; 2,5; 3,4; 4,3); e$ $X_6 = (0,07; 0,20; 0,33; 0,46; 0,59).$

Os valores de Y, Equação 4.1, resultaram na variação ilustrada na Figura 4.1. O menor valor foi 45, o maior 88, a média dos valores foi 66,5 e o desvio padrão 6,56.

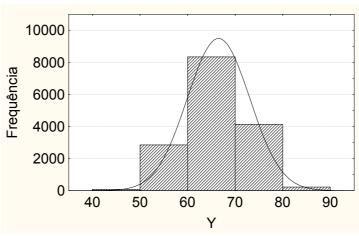


Figura 4.1 - Histograma dos valores de Y da Equação 4.1.

$$Y = 60 + \log X_1 + \frac{1}{X_2} - X_3^2 + X_4 + X_5^{0.5} - X_6^3$$
 (4.2)

Valores das variáveis para Equação 4.2:

 $X_1 = (200; 20000; 200000; 2000000);$

 $X_2 = (2; 1 0,5; 0,25; 0,125);$

 $X_3 = (0,1; 1; 2; 2,5; 3,5);$

 $X_4 = (1,9; 3,6; 5,3; 7,0; 8,7);$

 $X_5 = (2; 4; 15; 25; 39); e$

 $X_6 = (0,5; 1,2; 1,6; 2; 2,5).$

Nos valores de Y, Equação 4.2, as variações contidas na Figura 4.2 foram observadas. O menor valor foi 38, o maior 89, a média dos valores foi 65,49 e o desvio padrão, 8,2578.

As duas equações foram utilizadas para gerar os conjuntos de dados para serem analisados. Para cada variável, assumiram-se cinco valores distintos. Combinando cada valor, foram gerados 15.625 conjuntos de dados, contendo os valores das variáveis independentes e o resultado da aplicação da equação (variável dependente), para cada equação. Para aplicação da rede neural artificial, os dados foram agrupados em classes, da mesma forma que se agruparam os valores da análise sensorial (<69, ≥69 e <74, ≥74 e <79 e ≥79).

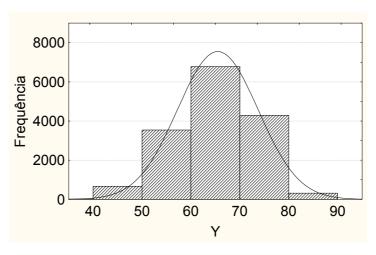


Figura 4.2 - Histograma dos valores de Y da Equação 4.2.

Em uma segunda situação, foi somado ao valor calculado por cada equação um valor aleatório (ε), que é uma variável aleatória com média zero e desvio padrão *um* variando no intervalo [-4,4], para simbolizar interferências na execução do experimento (ruído). Dessa forma, têm-se mais dois conjuntos com 15.625 valores.

Na Equação 4.1, sendo adicionado a ela o valor aleatório ε, observou-se dispersão dos valores conforme a Figura 4.3. O menor valor foi 44, o maior 89, a média dos valores foi 66,49 e o desvio padrão 6,6618.

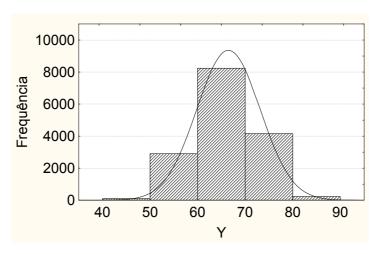


Figura 4.3. Histograma dos valores de Y da Equação 4.1 com adição da variável ε.

A Equação 4.2, sendo adicionado a ela o valor aleatório (ε), apresentou dispersão dos valores como apresentado na Figura 4.4. O menor valor foi 37, o maior 89, a média dos valores foi 65,49 e o desvio padrão 8,3098.

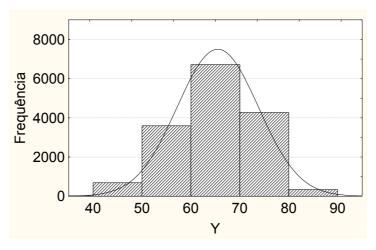


Figura 4.4 - Histograma dos valores de Y da Equação 4.2 com adição da variável ε.

Na terceira situação, repetiu-se o procedimento anterior, mas somando o valor aleatório multiplicado por dois (2 ε), representando uma interferência mais severa no experimento, sendo gerados, portanto, mais dois conjuntos com 15.625 valores.

A Equação 4.1, sendo adicionado a ela o valor aleatório multiplicado por dois, resultou na dispersão dos valores como os da Figura 4.5. O menor valor foi 44, o maior 92, a média dos valores foi 66,48 e o desvio padrão 6,8702.

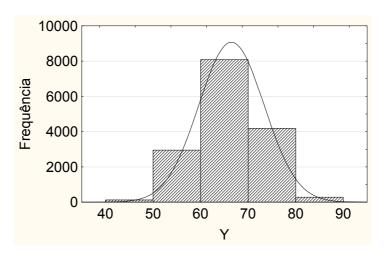


Figura 4.5 - Histograma dos valores de Y da Equação 4.1 adicionada ao valor aleatório multiplicado por dois (2 ε).

A Equação 4.2, sendo adicionado a ela o valor aleatório multiplicado por dois (2 ε), resultou na dispersão dos valores como os apresentados na Figura 4.6. O menor valor foi 31, o maior 86, a média dos valores foi 61,53 e o desvio padrão 8,4841.

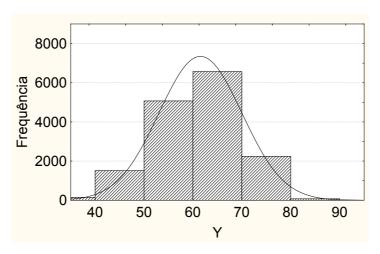


Figura 4.6 - Histograma dos valores de Y da Equação 4.2 adicionada ao valor aleatório multiplicado por dois (2 ε).

Aos seis conjuntos de dados foram aplicados os dois métodos de análises, regressão linear múltipla e rede neural artificial.

4.1.1. Equação polinomial

Na execução para os dados gerados pela aplicação da Equação 4.1, obteve-se, com a utilização do método de rede neural artificial, acerto de 100% na classificação e valores calculados pela rede igual aos valores esperados. O número de neurônios nas camadas intermediárias não alterou o resultado, pois em todas as configurações houve acerto de 100% na classificação.

Efetuando a regressão linear múltipla do mesmo conjunto de dados, obteve-se a Equação 4.3 como função de regressão. O valor do coeficiente de determinação, R², foi 0,9999.

$$\hat{Y} = 66 + 0.01 \times X_1 - 0.1 \times X_2 + 0.5 \times X_3 - X_4 + 2.5 \times X_5 - 7 \times X_6$$
 (4.3)

O alto índice de acerto dos dois métodos era esperado, pois, além da simplicidade da Equação 4.1, houve coincidência entre os valores e o modelo representado por essa equação.

4.1.2. Equação polinomial com interferência de ε

A execução para os dados gerados pela Equação 4.1, adicionada do valor de ε, resultou, com a utilização do método de rede neural artificial, acerto de 94,43% na classificação, para a configuração de rede (7, 5, 1) de neurônios por camada. Com a variação do número de neurônios nas camadas intermediárias, o menor valor de acerto na classificação foi de 94,11%, para a configuração de rede (5, 9, 1) de neurônios por camada.

A regressão linear múltipla teve como função de regressão a Equação 4.4, e o valor do coeficiente de determinação, R², foi 0,9773.

$$\hat{Y} = 65,9798 + 0,0100175 \times X_1 - 0,100113 \times X_2 + 0,500816 \times X_3 - 1,00308 \times X_4 + 2,51286 \times X_5 - 7,0288 \times X_6$$
(4.4)

Ocorreu redução mais acentuada no resultado apresentado pela rede neural artificial que na regressão linear múltipla, indicando que, nesse caso, o método de rede neural artificial é mais sensível às interferências nos valores experimentais, porém os dois métodos têm desempenho satisfatório.

4.1.3. Equação polinomial com interferência de 2 &

A execução para os dados gerados pela Equação 4.1 adicionada do valor de 2 ε teve, com a utilização do método de rede neural artificial, acerto de 89,00% na classificação, para a configuração de rede (7, 13, 1) de neurônios por camada. Com a variação do número de neurônios nas camadas intermediárias, o menor valor de acerto na classificação foi de 88,68%, para as configurações de rede (5, 7, 1), (5, 13, 1) e (7, 9, 1) de neurônios por camada.

A regressão linear múltipla teve como função de regressão a Equação 4.5. O valor do coeficiente de determinação, R², foi 0,9143.

$$\hat{Y} = 66,0342 + 0,0100147 \times X_1 - 0,10048 \times X_2 + 0,497407 \times X_3 - 0,99575 \times X_4 + 2,49374 \times X_5 - 7,01633 \times X_6$$
(4.5)

A interferência de 2 ε no experimento implicou redução de 11% (de 100% para 89%) de acerto no método de rede neural artificial. Na regressão linear múltipla, a redução do R² foi de 8,56% (de 0,9999 para 0,9143). Para simulação dos valores da Equação 4.1, os dois métodos apresentaram desempenhos equiparados para utilização.

4.1.4. Equação mista

A execução para os dados gerados pela Equação 4.2 teve, com a utilização do método de rede neural artificial, acerto de 98,08% na classificação, para as configurações de rede (7, 13, 1) e (9, 9, 1) de neurônios por camada. Com a variação do número de neurônios nas

camadas intermediárias, o menor valor de acerto na classificação foi de 96,23%, para a configuração de rede (5, 9, 1) de neurônios por camada.

A regressão linear múltipla teve, como função de regressão, a Equação 4.6. O valor do coeficiente de determinação, R², foi 0,8584.

$$\hat{Y} = 78,5234 + 0,0000012352 \times X_1 - 3,01612 \times X_2 - 3,55682 \times X_3 + 1,00196 \times X_4 + 0,129419 \times X_5 - 7,55434 \times X_6$$
(4.6)

O desempenho do método de rede neural artificial foi melhor quando aplicado aos dados decorrentes da aplicação da Equação 4.2, apresentando índice de acerto de 98,08%. O desempenho da regressão linear múltipla, aplicada ao mesmo conjunto de dados, foi inferior, com coeficiente de determinação, R², de 0,8584, indicando que 85,84% dos resultados podem ser explicados pela regressão linear múltipla.

4.1.5. Equação mista com interferência de ε

A execução para os dados gerados pela Equação 4.2 adicionada do valor ε apresentou, com a utilização do método de rede neural artificial, acerto de 94,82% na classificação, para a configuração de rede (9, 13, 1) de neurônios por camada. Com a variação do número de neurônios nas camadas intermediárias, o menor valor de acerto na classificação foi de 93,35%, para a configuração de rede (5, 13, 1) de neurônios por camada.

A aplicação da regressão linear múltipla ao mesmo conjunto de dados teve como função de regressão a Equação 4.7. O valor do coeficiente de determinação, R², foi 0,8458.

$$\hat{Y} = 78,4818 + 0,00000125006 \times X_1 - 3,01346 \times X_2 - 3,54965 \times X_3 + 1,00533 \times X_4 + 0,129618 \times X_5 - 7,55224 \times X_6$$
(4.7)

A interferência de ϵ causou pequena redução no desempenho dos dois métodos, indicando que, nos dois casos, o modelo assimila bem as interferências nos experimentos.

4.1.6. Equação mista com interferência de 2 ε

A execução para os dados gerados pela Equação 4.2 adicionada do valor de 2 ε, teve, com a utilização do método de rede neural artificial, acerto de 96,67% na classificação, para as configurações de rede (5, 5, 1) e (7, 9, 1) de neurônios por camada. Com a variação do número de neurônios nas camadas intermediárias, o menor valor de acerto na classificação foi de 96,29%, para a configuração de rede (9, 9, 1) de neurônios por camada.

A aplicação da regressão linear múltipla ao mesmo conjunto de dados teve como função de regressão a Equação 4.8. O valor do coeficiente de determinação, R², foi 0,8093.

$$\hat{Y} = 74,5849 + 0,00000122589 \times X_1 - 3,00292 \times X_2 - 3,54384 \times X_3 + 0,997552 \times X_4 + 0,129325 \times X_5 - 7,56911 \times X_6$$
(4.8)

A interferência de 2 ϵ influenciou mais o método de regressão linear múltipla, com redução de 5,72% (de 0,8584 para 0,8093) no valor de R². O método da rede neural artificial apresentou redução de 1,82% (de 98,08 para 96,29).

Analisando os resultados, pôde-se verificar que, no caso de um experimento em que um modelo de equação como a Equação 4.1 para representação dos valores, os métodos de regressão linear múltipla e de rede neural artificial podem ser igualmente utilizados.

Em um experimento cujo modelo pode ser representado por uma equação equiparada à Equação 4.2, envolvendo logaritmo e polinômio com potências diversas, o modelo de regressão linear tem desempenho pior que o método de rede neural artificial. O uso do método de rede neural artificial permitiu assimilar um modelo mais complexo e filtrar a interferência nos dados desse modelo.

No caso de modelagem de eventos biológicos, a complexidade do modelo é maior e envolve, geralmente, modelos exponenciais. Nesse caso, é de se esperar que os modelos de rede neurais artificiais tenham desempenho melhor que o desempenho da regressão linear múltipla.

Esses resultados de desempenho do método de rede neural artificial, superiores aos obtidos por meio de regressão linear múltipla, são compatíveis com os apresentados por Ciurana et al. (2008), Sousa et al. (2007) e Verlinden, et al. (2008), que demonstraram, em outras aplicações, melhor utilização do método de rede neural artificial.

4.2. Regressão Linear Simples

O desempenho do método de rede neural artificial foi, inicialmente, comparado à regressão linear simples. Foi realizada análise individual de interferência da alteração nos valores da análise sensorial com os valores das análises químicas.

A análise sensorial dos 413 conjuntos de dados utilizados resultou na dispersão de valores, como os apresentados no gráfico de frequência da Figura 4.7.

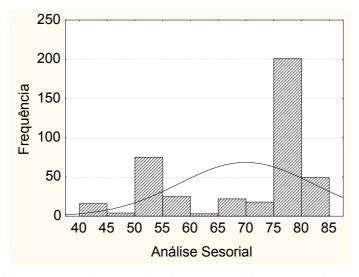


Figura 4.7 - Histograma dos resultados de análise sensorial.

Os resultados da análise sensorial resultaram em menor valor igual a 44, maior valor igual a 82, média dos valores igual a 69,98 e desvio padrão igual a 12,01.

4.2.1. Açúcar Redutor

A Figura 4.8 representa a frequência dos resultados da análise de açúcar redutor e a linha de distribuição normal.

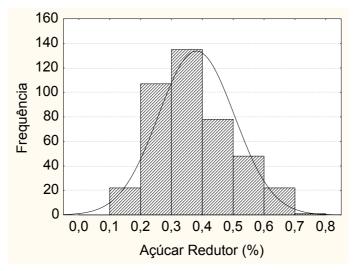


Figura 4.8 - Histograma dos resultados da análise de açúcar redutor.

Foram observados os seguintes valores dos resultados da análise de açúcar redutor: menor valor igual a 0,15%, maior valor igual a 0,71%, média dos valores igual a 0,3809% e desvio padrão igual a 0,1232%.

A regressão linear dos resultados de análise sensorial (A_{Se}) em função de açúcar redutor (A_{Rd}), nos 413 conjuntos de dados experimentais, resultou na Equação 4.9, cujo coeficiente de determinação, r^2 , foi de 0,1396. Na Figura 4.9, apresentam-se os resultados da regressão linear.

$$\hat{A}_{Se} = 83,8569 - 36,4338 \times A_{Rd} \tag{4.9}$$

A utilização do método de rede neural artificial aplicado aos resultados da análise de açúcar redutor e análise sensorial resultou em melhor acerto de classificação o valor de 43,90% para a configuração de (9, 9, 1) neurônios por camada.

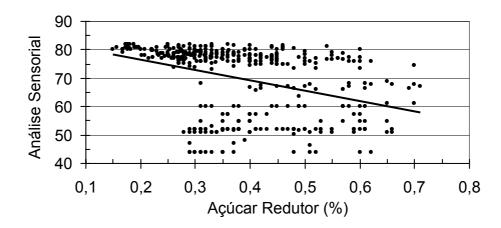


Figura 4.9 - Regressão linear da análise sensorial em função dos valores da análise de açúcar redutor.

A aplicação do método de rede neural artificial teve melhor desempenho que a regressão linear, uma vez que o coeficiente de determinação indica que somente 13,96% dos resultados de análise sensorial são explicados pela regressão. O desempenho do método, apesar de indicar um índice de acerto pequeno, abaixo da metade dos casos, mesmo assim foi melhor que a regressão linear.

4.2.2. Açúcar não redutor

Na Figura 4.10, observam-se a frequência dos resultados da análise do açúcar não redutor e a linha de distribuição normal.

Foram observados os seguintes valores dos resultados da análise de açúcar não redutor: menor valor igual a 1,95%, maior valor igual a 10,38%, média dos valores igual a 6,5125% e desvio padrão igual a 1,5987%.

A regressão linear dos resultados de análise sensorial (A_{Se}) em função do açúcar não redutor (A_{nR}), para os 413 conjuntos de dados experimentais resultou na Equação 4.10, cujo coeficiente de determinação, r^2 , foi de 0,0865. Na Figura 4.11, observam-se os resultados da regressão linear.

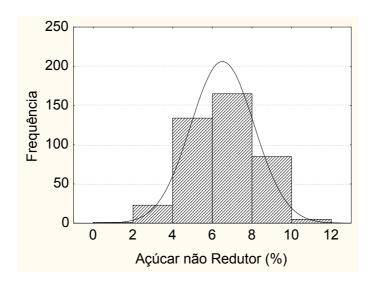


Figura 4.10 - Histograma dos resultados da análise de açúcar não redutor.

$$\hat{A}_{Se} = 55,5830 + 2,21072 \times A_{nR} \tag{4.10}$$

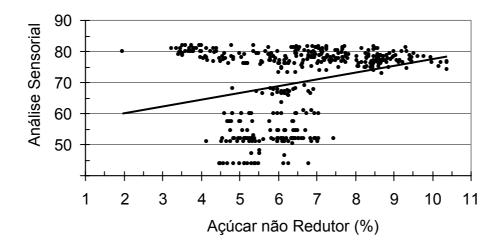


Figura 4.11 - Regressão linear da análise sensorial em função dos valores da análise de açúcar não redutor.

A utilização do método de rede neural artificial aplicado aos resultados da análise de açúcar não redutor e da análise sensorial resultou em melhor acerto de classificação o valor de 41,46% nas configurações de (5, 7, 1), (5, 13, 1) e (9, 7, 1) neurônios por camada.

Nesse caso, também a aplicação do método de rede neural artificial teve melhor desempenho que a regressão linear, uma vez que o

coeficiente de determinação indica que somente 8,65% dos resultados de análise sensorial são explicados pela regressão.

4.2.3. Acidez Titulável Total

Na Figura 4.12, observam-se a frequência dos resultados da análise de acidez titulável total e a linha de distribuição normal.

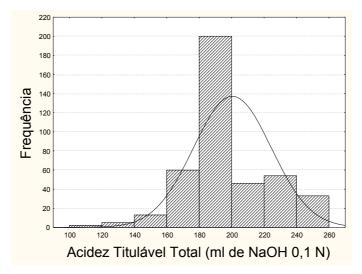


Figura 4.12 - Histograma dos resultados da análise de acidez titulável total.

Foram observados os seguintes valores dos resultados da análise de acidez titulável total: menor valor igual a 115,83 ml de NaOH 0,1 N, maior valor igual a 255 ml de NaOH 0,1 N, média dos valores igual a 200,44 ml de NaOH 0,1 N e desvio padrão igual a 24,02 ml de NaOH 0,1 N.

A regressão linear dos resultados de análise sensorial (A_{Se}) em função da acidez titulável total (A_{TT}), para os 413 conjuntos de dados experimentais, resultou na Equação 4.11, cujo coeficiente de determinação, r^2 , foi 0,2677. Na Figura 4.13, observa-se o resultado da regressão linear.

$$\hat{A}_{Se} = 121,840 - 0,258718 \times A_{TT} \tag{4.11}$$

A utilização do método de rede neural artificial aplicado aos resultados da análise de acidez titulável total e da análise sensorial teve melhor acerto de classificação o valor de 53,66% nas configurações de (5, 9, 1), (5, 13, 1), (7, 7, 1), (7, 9, 1), (7, 13, 1), (9, 7, 1) e (9, 9, 1) neurônios por camada.

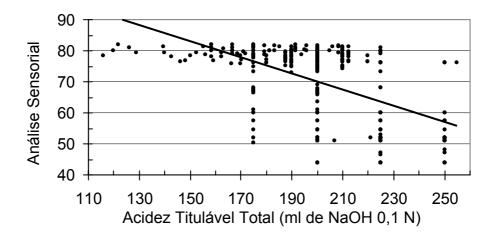


Figura 4.13 - Regressão linear da análise sensorial em função dos valores da análise da acidez titulável total.

A aplicação do método de rede neural artificial teve melhor desempenho, com acerto de 53,66%, uma vez que o coeficiente de determinação da regressão linear indicou que 26,77% dos resultados de análise sensorial foram explicados pela regressão.

4.2.4. Condutividade Elétrica

Na Figura 4.14, observam-se a frequência dos resultados da análise da condutividade elétrica e a linha de distribuição normal.

Foram verificados os seguintes valores dos resultados da análise de condutividade elétrica: menor valor igual a 36,76 μ S cm⁻¹ g⁻¹, maior valor igual a 297 μ S cm⁻¹ g⁻¹, média dos valores igual a 155,9102 μ S cm⁻¹ g⁻¹ e desvio padrão igual a 49,8011 μ S cm⁻¹ g⁻¹.

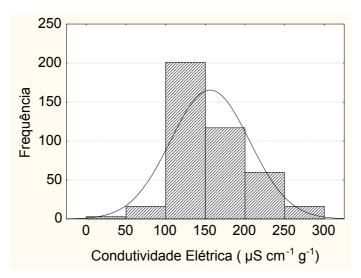


Figura 4.14 - Histograma dos resultados da análise de condutividade elétrica.

A regressão linear dos resultados de análise sensorial (A_{Se}) em função da condutividade elétrica (C_{El}), para os 413 conjuntos de dados experimentais, resultou na Equação 4.12, cujo coeficiente de determinação, r^2 , foi 0,5412. A Figura 4.15 contém os resultados da regressão linear.

$$\hat{A}_{Se} = 97,6475 - 0,177456 \times C_{El} \tag{4.12}$$

A utilização do método de rede neural artificial aplicado aos resultados da análise de condutividade elétrica e da análise sensorial teve como resultado de melhor acerto de classificação o valor de 68,29% para a configuração de (5, 7, 1) neurônios por camada.

O acerto pela aplicação do método de rede neural artificial, de 68,29%, foi melhor que pela regressão linear, uma vez que o coeficiente de determinação indicou que 54,12% dos resultados da análise sensorial foram explicados pela regressão. Esses dois índices indicam que os valores da análise sensorial se correlacionam melhor com os valores da análise de condutividade elétrica.

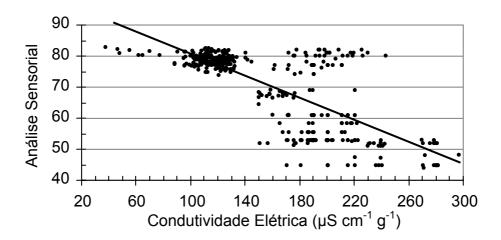


Figura 4.15 - Regressão linear da análise sensorial em função dos valores da análise de condutividade elétrica.

4.2.5. Lixiviação de Potássio

Na Figura 4.16, representam-se a frequência dos resultados da análise de lixiviação de potássio e a linha de distribuição normal.

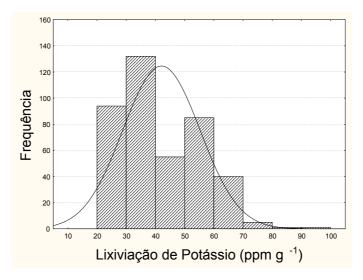


Figura 4.16 - Histograma dos resultados da análise de lixiviação de potássio.

Foram observados os seguintes valores dos resultados da análise de lixiviação de potássio: menor valor igual a 24,18 ppm g⁻¹, maior valor

igual a 91,71 ppm g⁻¹, média dos valores igual a 42,0599 ppm g⁻¹ e desvio padrão igual a 13,2269 ppm g⁻¹.

A regressão linear dos resultados de análise sensorial (A_{Se}) em função da lixiviação de potássio (L_{Po}), para os 413 conjuntos de dados experimentais, resultou na Equação 4.13, cujo coeficiente de determinação, r^2 , foi de 0,2906. Na Figura 4.17, observa-se o resultado dessa regressão linear.

$$\hat{A}_{Se} = 90,5751 - 0,489655 \times L_{Po} \tag{4.13}$$

A utilização do método de rede neural artificial aplicado aos resultados da análise de lixiviação de potássio e da análise sensorial teve como resultado de melhor acerto de classificação o valor de 51,22% para a configuração de (5, 5, 1) neurônios por camada.

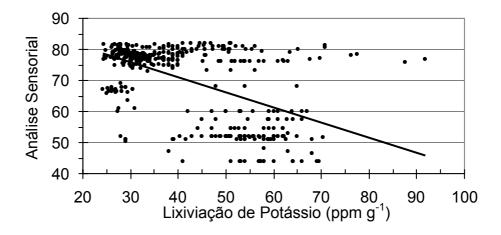


Figura 4.17 - Regressão linear da análise sensorial em função dos valores da análise de lixiviação de potássio.

O acerto de 51,22%, obtido pela utilização do método de rede neural artificial, foi melhor que o resultado com a regressão linear, uma vez que o coeficiente de determinação indicou que somente 29,06% dos resultados da análise sensorial foram explicados pela regressão.

4.2.6. Polifenóis

Na Figura 4.18, observam-se a frequência dos resultados da análise de polifenóis e a linha de distribuição normal.

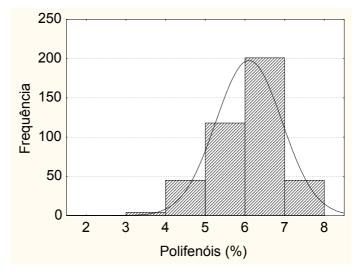


Figura 4.18 - Histograma dos resultados da análise de polifenóis.

Foram observados os seguintes valores dos resultados da análise de polifenóis: tiveram o menor valor igual a 3,42%, o maior valor igual a 7,9%, a média dos valores igual a 6,10% e o desvio padrão igual a 0,83%.

A regressão linear dos resultados da análise sensorial (A_{Se}) em função de polifenóis (P_{ol}), para os 413 conjuntos de dados experimentais, resultou na Equação 4.14, cujo coeficiente de determinação, r^2 , foi de 0,1373. A Figura 4.19 contém os resultados dessa regressão linear.

$$\hat{A}_{Se} = 102,556 - 5,33970 \times P_{ol} \tag{4.14}$$

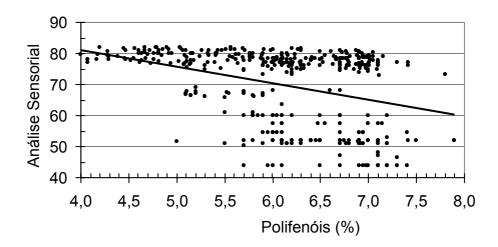


Figura 4.19 - Regressão linear da análise sensorial em função dos valores da análise de polifenóis.

A utilização do método de rede neural artificial aplicado aos resultados da análise de polifenóis e da análise sensorial teve como resultado de melhor acerto de classificação o valor de 39,02% para a configuração de (5, 5, 1) neurônios por camada.

O acerto de 39,02%, obtido pela aplicação do método de rede neural artificial, é melhor que o resultado da regressão linear, uma vez que o coeficiente de determinação indica que somente 13,73% dos resultados de análise sensorial são explicados pela regressão.

O resultado do resíduo, constante no Apêndice 1, e do coeficiente de determinação da análise de regressão linear simples dos valores da análise sensorial em função dos valores de cada análise química utilizada de forma individual reforça a busca por modelos que possam apresentar melhor desempenho na explicação das variações nos dados experimentais.

4.3. Análise Sensorial em Função dos resultados de Acidez Titulável Total, Condutividade Elétrica e Lixiviação de Potássio

A tentativa de correlacionar, de forma isolada, os valores da análise sensorial aos das análises químicas não teve resultados adequados. Portanto, verificou-se a necessidade de trabalhar com os valores das análises de forma conjunta.

A utilização do método de rede neural artificial aplicado aos resultados das análises de acidez titulável total, da condutividade elétrica e da lixiviação de potássio, de forma conjunta, proporcionou acerto de classificação, para análises sensoriais, com valores acima de 50%. Então, fez-se a aplicação do método de rede neural artificial envolvendo os valores resultantes dessas três análises, assim como uma análise de regressão linear múltipla para verificação de desempenho dos dois métodos nesse tipo de associação de dados.

A regressão linear múltipla desses dados resultou na Equação 4.15, cujo coeficiente de determinação, R², foi 0,5736.

$$\hat{A}_{Se} = 114,806 - 0,0953072 \times A_{TT} - 0,131843 \times C_{El} - 0,122815 \times L_{Po}$$
(4.15)

Esse desempenho da regressão linear múltipla não indicou melhoria significativa na composição das três análises, uma vez que o valor do coeficiente de determinação, R², para a análise de regressão dos valores da análise sensorial em função da análise de condutividade elétrica foi 0,5412.

A utilização do método de rede neural artificial aplicado aos resultados das análises de acidez titulável total, da condutividade elétrica, da lixiviação de potássio e da análise sensorial proporcionou acerto de classificação de 75,61% para as configurações de (5, 7, 1), (5, 13, 1), (7, 5, 1), (7, 13, 1) e (9, 9, 1) neurônios por camada. Esse resultado, de forma contrária ao da regressão linear múltipla, indica que houve melhoria na

composição das três análises. Isso porque, de forma isolada, a aplicação do método de rede neural artificial, de melhor desempenho, foi a rede obtida com os valores da análise de condutividade elétrica, com acerto de 68,29%.

4.4. Análise Sensorial em Função de Todas as Análises Químicas

A correspondência entre os resultados da análise sensorial e os resultados das análises químicas foi verificada com uma configuração, envolvendo todas as análises químicas e a análise sensorial.

A regressão linear múltipla dos resultados da análise sensorial (A_{Se}) em função das análises de açúcares redutor (A_{Rd}) e não redutor (A_{nR}), de acidez titulável total (A_{TT}), da condutividade elétrica (C_{el}), da lixiviação de potássio (L_{Po}) e de polifenóis (P_{ol}), para os 413 conjuntos de dados experimentais, resultou na Equação 4.16, cujo coeficiente de determinação, R^2 , foi de 0,6681.

$$\hat{A}_{Se} = 121,553 - 28,0864 \times A_{Rd} + 0,707124 \times A_{nR} - 1,71888 \times P_{ol} - 0,0631717 \times A_{TT} - 0,127175 \times C_{El} - 0,0595256 \times L_{Po}$$
(4.16)

A utilização do método de rede neural artificial aplicado aos resultados de todas as análises químicas e análise sensorial resultou em um acerto de classificação de 85,37%, para a configuração de (5, 9, 1) neurônios por camada. Nesse caso foram utilizados os 413 conjuntos de dados, sendo 331 conjuntos utilizados no treinamento, 41 na validação durante o treinamento e 41 nos testes após o treinamento. O resultado de acerto de 85,37% nos testes indica que, dos 41 conjuntos de dados de teste, houve acerto da classe, definida pela análise sensorial, em 35 e erro em 6 conjuntos de dados.

Nessa configuração, comparada com a anterior (item 4.3), que teve melhor desempenho naquele teste, a melhora na regressão linear múltipla

foi expressiva, pois o coeficiente de determinação, R², passou de 0,5736 para 0,6681.

O resultado de classificação (85,37%) pelo uso do método de rede neural artificial foi superior ao valor de 75,61% da execução anterior. Esse resultado indica que houve correspondência entre a variação dos valores da análise sensorial com a variação dos valores das análises químicas. Segundo o modelo de rede neural artificial estabelecido, no caso em estudo a classificação do tipo de bebida do café é explicada em mais de 85% pela variação dos valores das análises químicas quando analisados em conjunto.

4.5. Teste da Rede Neural Utilizando Dados de Campo

Na aplicação do método de rede neural artificial, utilizaram-se dados de treinamento e de testes provenientes dos procedimentos da colheita, secagem e armazenamento controlados, possibilitando a não inserção de variáveis adicionais. Um teste a ser efetuado é verificar o desempenho do método de rede neural artificial utilizando amostra de dados provenientes dos procedimentos de colheita, secagem e armazenamento não controlados.

Foram obtidas amostras de cafés provenientes de várias propriedades da região Sul de Minas Gerais, no Município de Machado. Essas amostras foram submetidas às mesmas análises, tendo sido obtidos 86 conjuntos de dados. A Tabela 4.1 contém as informações estatísticas desses dados e, a Figura 4.20, a distribuição deles.

Com a utilização da rede neural artificial, obtida com o treinamento com os 413 conjuntos de dados, que resultou em acerto 85,37%, foi feita a simulação com os 86 conjuntos de dados, obtendo-se classificação correta de 75,58%.

Foram gerados os valores da análise sensorial, utilizando-se a equação de regressão linear múltipla, Equação 4.16, e, em seguida, esses valores foram transformados em classes, utilizadas pela rede

neural artificial. Esses valores coincidiram em 18,60% com os valores da análise sensorial da amostra de teste.

Tabela 4.1 - Estatística dos dados da amostra de teste

	$A_{Rd}^{}^{*}}$	A_{nR}^*	P _{ol} *	A _{TT} *	C _{EI} *	L_{Po}^*	A _{Se} *
Menor	0,305	4,935	4,950	170,000	72,584	22,421	43,250
Maior	0,735	6,983	6,750	250,000	156,257	56,839	83,167
Média	0,519	5,970	5,756	203,000	106,239	36,861	76,076
Desvio padrão	0,101	0,527	0,387	16,367	16,452	7,348	9,289

A_{Rd} – Açúcar redutor (%)

A_{nR} – Açúcar não redutor (%)

P_{ol} – Polifenóis (%)

A_{TT} – Acidez titulável total (ml de NaOH 0,1 N)

C_{EI} – Condutividade elétrica (μS cm⁻¹ g⁻¹)

L_{Po} – Lixiviação de potássio (ppm g⁻¹)

A_{Se} – Análise sensorial

Com a utilização do método de rede neural artificial, obteve-se melhor resultado de classificação do tipo da bebida do café do que o apresentado pela regressão linear múltipla. Todavia, esse resultado foi inferior ao observado quando se utilizou o método de rede neural artificial aplicada aos dados experimentais, em condições controladas. Isso indica que o método é sensível aos dados para os quais a rede neural artificial foi treinada, o que é uma característica positiva, pois demonstra que há diferença nos valores das análises químicas e da análise sensorial utilizadas para gerar a rede neural artificial. Para se ter o desempenho desejado do método de rede neural artificial, a rede deverá ser treinada com dados apropriados para sua utilização posterior, ou seja, deve ser treinada com o mesmo tipo de dados em que ela for utilizada.

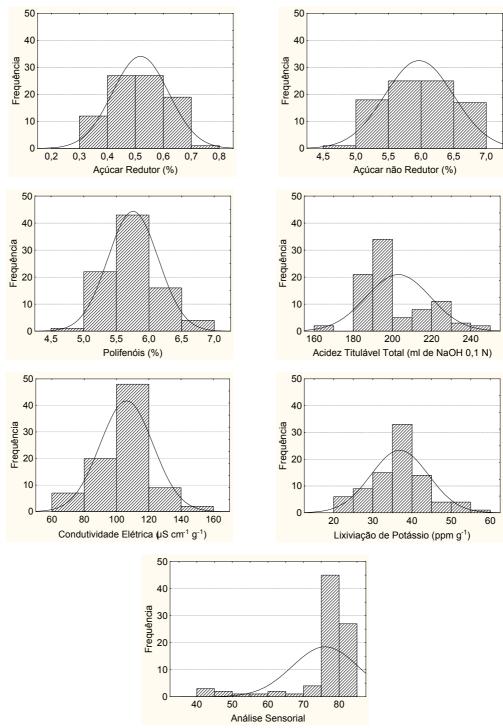


Figura 4.20 - Histograma dos resultados das análises químicas e análise sensorial da amostra de campo.

4.6. Discussão dos resultados

Os resultados de desempenho, de acerto na classificação do tipo da bebida do café, da aplicação do método de rede neural artificial (RNA) para relacionar os valores da análise sensorial e os valores das análises químicas de amostras de café em que os procedimentos pós-colheita foram controlados em comparação aos não controlados, 85,37% e 75,58%, respectivamente, nos permite concluir que esse método é sensível ao tipo de amostra utilizado. Pode-se então obter diferentes redes neurais artificiais treinadas com resultados de análises sensorial e químicas, de diferentes tipos de amostras de café. Quando o teste de classificação de uma determinada amostra for efetuado, o índice de acerto na utilização da RNA será melhor para a rede que foi treinada para aquele tipo de amostra. Conclui-se com isso que a utilização do método de RNA é sensível à amostra do material utilizada para seu treinamento.

A tabela 4.2 contém os resultados de desempenho da aplicação do método de RNA e o método de regressão linear (RL). Há relação direta entre os resultados dos desempenhos da aplicação desses métodos no estabelecimento da correspondência entre a variação dos valores da análise sensorial e os valores das análises químicas. Observou-se que os melhores desempenhos da aplicação do método de RNA ocorreram onde também houve os melhores desempenhos da aplicação do método de RL.

A análise dos dados, quando se tem um número variado de fatores condicionantes, utilizando regressão linear simples (RLS), não se mostrou eficiente. A análise, utilizando o método de RNA, apresentou melhor desempenho que a RLS. A análise conjunta, utilizando os resultados de todas as análises químicas das amostras de café, se mostrou mais eficiente. Com a utilização do método de regressão linear múltipla (RLM), conseguiu-se elevar o coeficiente de determinação para o valor de 0,6681 e, no método de RNA, conseguiu-se um índice de acerto de 85,37% na correlação entre os valores da análise sensorial e os valores resultantes das análises químicas.

Tabela 4.2 - Comparativo de desempenho da RL e RNA.

Análises químicas utilizadas	Coeficiente de	Acerto na RNA	
	Determinação (RL)		
Polifenóis	0,1373	39,02%	
Açúcar não Redutor	0,0865	41,46%	
Açúcar Redutor	0,1396	43,90%	
Lixiviação de Potássio	0,2906	51,22%	
Acidez Titulável Total	0,2677	53,66%	
Condutividade Elétrica	0,5412	68,29%	
Acidez Titulável Total,			
Condutividade Elétrica e	0,5736	75,61%	
Lixiviação de Potássio			
Todas	0,6681	85,37%	

O desempenho de 85,37% de acerto, na classificação do tipo da bebida do café, obtido pelo método de RNA, é um forte argumento para afirmar que existe uma relação entre a variação dos resultados de análise sensorial e os resultados das análises químicas de amostras de café. Como o valor do coeficiente de determinação, resultante da aplicação do método de RLM, no mesmo experimento, foi de 0,6681, isso nos permite concluir que o método de RNA apresenta desempenho superior ao método de RNA.

5. CONCLUSÃO

Esse trabalho demonstra o potencial de utilização do método de rede neural artificial na identificação da qualidade da bebida do café arábica, utilizando resultados de análises químicas.

O método de rede neural artificial é capaz de detectar variações em um mesmo tipo de bebida para diferentes amostras de café.

Há relação direta entre os resultados das simulações obtidos pelo método de rede neural artificial e aqueles obtidos por regressão linear.

A aplicação do método de rede neural artificial aos dados experimentais demonstra haver correspondência entre a variação dos resultados da análise sensorial e o resultado das análises químicas efetuadas.

O método de rede neural artificial é mais eficiente que o método de regressão linear múltipla para classificar o tipo de bebida do café em função dos resultados das análises químicas das amostras.

6. TRABALHOS FUTUROS

Desenvolver um sistema de denominação de origem de café, utilizando o método de redes neurais artificiais treinadas com resultados de análises químicas de amostras de café de diferentes regiões produtoras.

Comparar o desempenho do método de redes neurais artificiais, na classificação do tipo de bebida do café, os métodos que utilizem outras técnicas computacionais: rede neural probabilística e rede neuro-fuzzy, entre outras.

7. REFERÊNCIAS

- AFONSO JÚNIOR, P. C.; CORRÊA, P. C.; GONELI, A. L. D.; SILVA, F. S. Contribuição das etapas do pré-processamento para qualidade do café. **Revista Brasileira de Armazenamento**, Viçosa, Especial Café, n. 8, p. 46-53, 2004.
- ANDERSON, K. A.; SMITH, B. W. Chemical Profiling To Differentiate Geographic Growing Origins of Coffee. **Journal of Agricultural and Food Chemistry**, v. 50, p. 2068-2075, 2002. DOI: 10.1021/jf011056v.
- BORÉM, F. M.; MARQUES, E. R.; ALVES, E. Ultrastructural analysis of drying damage in parchment Arabica coffee endosperm cells. **Biosystems Engineering**. v. 99, n. 1, p. 62-66, jan. 2008. DOI: 10.1016/j.biosystemseng.2007.09.027.
- BORÉM, F. M.; RIBEIRO, D. M.; PEREIRA, R. G. F. A.; ROSA, S. D. V. F.; MORAIS, A. R. Qualidade do café submetido a diferentes temperaturas, fluxos de ar e períodos de pré-secagem. **Coffee Science**, v. 1, n. 1, p. 55-63, Lavras, abr./jun. 2006.
- BRAGA, A. P.; CARVALHO, A. C. P. L. F.; LUDERMIR, T. B. **Redes neurais artificiais teoria e aplicações**. Rio de Janeiro, RJ: LTC, 2000. 262 p.
- CACCER. Protocolos para análise sensorial de café, metodologia SCAA. Fev. 2005. Disponível em: www.cafedocerrado.org. Acesso em 04/set./2009.
- CAWLEY, G. C.; JANACEK, G. J.; HAYLOCK, M. R.; DORLING, S. R. Predictive uncertainty in environmental modeling. **Neural Networks**, v. 20, p. 537-549, 2007. DOI:10.1016/j.neunet.2007.04.024.
- CHAGAS, S. J. R.; MALTA, M. R.; PEREIRA, R. G. F. A. Potencial da região Sul de Minas Gerais para a produção de cafés especiais. **Ciência e grotecnologia**, Lavras, v. 29, n. 3, p. 590-597, MG: maio/jun. 2005.
- CHARUMPORN, B.; YOSHIOKA, M.; FUJINAKA, T.; OMATU, S. Identify Household Burning Smell Using an Electronic Nose System with Artificial Neural Networks. In: **Computational Intelligence in Robotics and Automation**. Japan: Kobe, 2003. p. 1070-1074.
- CHEN, C.; CHEN, S.; WANG, C.; YANG, I.; HSIAO S.; TSAI, C. Evaluation of nitrogen content in cabbage seedlings using hyper-spectral

- images. Sensing and Instrumentation for **Food Quality and Safety**, v. 2, n. 2, p. 97-102, jun. 2008. DOI: 10.1007/s11694-008-9041-5.
- CHERKASSKY, V.; MA, Y. Another look at statistical learning theory and regularization. **Neural Networks**, v. 22, p. 958-969, 2009. DOI:10.1016/j.neunet.2009.04.005.
- CIURANA, J.; QUINTANA, G.; GARCIA-ROMEU, M. L. Estimating the cost of vertical high-speed machining centers, a comparison between multiple regression analysis and the neural networks approach. **International Journal of Production Economics**, v. 115, 171-178, 2008. DOI: 10.1016/j.ijpe.2008.05.009.
- CORADI, P. C.; BORÉM, F. M.; SAATH, R.; MARQUES, E. R. Effect drying and storage conditions on the quality of natural and washed coffee. **Coffee Science**, Lavras, v. 2, n.1, p. 38-47, jan.-jun. 2007.
- DU, C.; ZHOU, J. Evaluation of soil fertility using infrared spectroscopy: a review. **Environmental Chemistry Letters**, v. 7, n. 2, p. 97-113, jun. 2009. DOI: 10.1007/s10311-008-0166-x.
- DUTTA, R.; KASHWAN, K. R.; BHUYAN, M.; HINES, E. L.; GARDNER J. W. Electronic nose based tea quality standardization. **Neural Networks**, v. 16, p. 847-853, 2003. DOI:10.1016/S0893-6080(03)00092-3.
- ERENTUR, K.; ERENTUR, S.; TABIL, L. G. A comparative study for the estimation of dynamical drying behavior of Echinacea angustifolia: regression analysis and neural network. **Computers and electronics in agriculture**, v. 45, p. 71-90, 2004.
- FERNANDES, M. Uso de cloreto de benzalcônio na pré-colheita e suas iterações com a colheita e pós-colheita na qualidade do café. 2008. 91 f. Tese (Doutorado em Ciência dos Alimentos) Universidade Federal de Lavras, Lavras, MG, 2008.
- FIGUEIREDO, L. P. **Perfil sensorial, químico e proteômico relacionados ao processamento pós-colheita de cultivares de cafeeiro**. Lavras, MG: UFLA, 2009. (Projeto de Pesquisa).
- FIRAT, M.; YURDUSEV, M. A.; TURAN, M. E. Evaluation of Artificial Neural Network Techniques for Municipal Water Consumption Modeling. **Water Resources Management**, v. 23, n. 4, 617-632, mar. 2009. DOI 10.1007/s11269-008-9291-3.

- GARRUTI, R. S.; PUPO, L. M.; TEXEIRA, A. A.; PEREIRA, L. S. P. Determinação da bebida de café "riada". **Coletânea do Instituto Tecnológico de Alimentos**, v. 2, p. 243-249, 1968.
- GOULART, P. F. P.; ALVES, J. D.; MALTA, M. R.; MAGALHÃES, M. M.; PEREIRA, R. G. F. A.; MEYER, L. E. Análise comparativa entre lixiviação de potássio, condutividade elétrica, ácido clorogênico e métodos de quantificação da atividade da polifenol oxidase em extrato semipurificado de amostras de café de diferentes padrões de qualidade. 3, 2003, Porto Seguro. In: Simpósio de pesquisa dos cafés do brasil e workshop internacional de café & saúde. Brasília: Embrapa Café, 2003. 447 p. p. 249-250.
- GRIVAS, G.; CHALOULAKOU, A. Artificial neural network models for prediction of PM10 hourly concentrations, in the Greater Area of Athens, Greece. **Atmospheric Environment**, v. 40, p. 1216-1229, 2006. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2005.10.036.
- GUELI, N.; PICCIRILLO G.; TROISIA, G.; CICCONETTI, P.; MELONI, F.; ETTORRE, E.; VERICO, P.; D'ARCANGELO, E.; CACCIAFESTA, M. The influence of lifestyle on cardiovascular risk factors Analysis using a neural network. **Archives of Gerontology and Geriatrics**, v. 40, p. 157-172, 2005. DOI:10.1016/j.archger.2004.08.002.
- HAGAN, M. T. **Neural network design**. 2. ed. Boston- MA, EUA: PWS Publishing Company, 2002.
- HAYKIN, S. **Redes neurais**. 2. ed. Rio de Janeiro: Bookman Companhia, 2000. 900 p.
- HERVÁS-MARTÍNEZ, C.; MARTÍNEZ-ESTUDILLO, F. J.; CARBONERO-RUZ, M. Multilogistic regression by means of evolutionary product-unit neural networks. **Neural Networks**, v. 21, p. 951-961, 2008. DOI: 10.1016/j.neunet.2007.12.052.
- ISQUIERDO, E. P. Secagem e qualidade do café cereja desmucilado submetido a diferentes períodos de repouso. 2008. 98 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Agrícola) Universidade Federal de Lavras, Lavras, MG, 2008.
- KERMANI, B. G.; SCHIFFMAN, S. S.; NAGLE, H. T. Performance of the Levenberg–Marquardt neural network training method in electronic nose applications. **Sensors and Actuators B Chemical**, v. 110, p. 13-22, 2005. doi:10.1016/j.snb.2005.01.008.

- KHOSHGOFTAAR, T. M.; GAO, K. Count Models for Software Quality Estimation. **IEEE Transactions on Reliability**, v. 56, n. 2, jun. 2007. Digital Object Identifier 10.1109/TR.2007.896757.
- KORJANI, M. M.; BAZZAZ, O.; MENHAJ, M. B. Real time identification and control of dynamic systems using recurrent neural networks. **Artificial Intelligence Review**, 2009. DOI 10.1007/s10462-009-9111-z.
- LINGLE, T. R. The coffee cupper's handbook: systematic guide to the sensory evaluation of coffee's flavor. 3. ed. Long Beach California, EUA: Specialty Coffee Association of America, 2001. 71 p.
- LIU, H.; XIE, D.; WU, W. Soil water content forecasting by ANN and SVM hybrid architecture. **Environmental Monitoring and Assessment**, v. 143, n. 1-3, p.187-193, aug. 2008. DOI 10.1007/s10661-007-9967-9.
- LU, J.; HUANG, G.; LI, S. A Study of Maneuvering Control for an Air Cushion Vehicle Based on Back Propagation Neural Network. **Journal of Shanghai Jiaotong University (Science)**, v. 14, n. 4, p. 482-485, aug. 2009. DOI: 10.1007/s12204-009-0482-8.
- MALTA, M. R.; PEREIRA, R. G. F. A.; CHAGAS, S. J. R. Condutividade elétrica e lixiviação de potássio do escudado de grãos de café: alguns fatores que podem influenciar essas avaliações. **Ciência e Agrotecnologia**, Lavras, v. 29, n. 5, p. 1015-1020, set./out. 2005.
- MAPA Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento. Instrução Normativa No 8 de 11 de junho de 2003. Aprova o Regulamento Técnico de Identidade e de Qualidade para a Classificação do Café Beneficiado Grão Cru. Ministro Roberto Rodrigues. **Diário Oficial** (da República federativa do Brasil). Brasília, p. 4, 13 de Junho de 2003, Seção 1.
- MAZUROWSKI, M. A., HABASA P. A., ZURADAA J. M., LOB J. Y., BAKERB J. A., TOURASSIB G. D. Training neural network classifiers for medical decision making: The effects of imbalanced datasets on classification performance. **Neural Networks**, v. 21, p. 427-436, 2008. DOI: 10.1016/j.neunet.2007.12.031.
- MENDONÇA, L. M. V. L.; PEREIRA, R. G. F. A.; MENDES, A. N. G.; BORÉM, F. M.; MARQUES, E. R. Composição química de grãos crus de cultivares de *Coffea arabica* L. suscetíveis e resistentes à *Hemileia vastatrix Berg et Br.* **Ciência e Agrotecnologia**, Lavras, v. 31, n. 2, p. 413-419, mar.-abr. 2007.

- MITTAL, G. S.; ZHANG, J. Artificial Neural Network-based Psychrometric Predictor. **Biosystems Engineering. Information Technology and the Human Interface,** v. 85, n. 3, p. 283-289, 2003. DOI: 10.1016/ S1537-5110(03)00071-0.
- NOBRE, G. W. **Processamento e qualidade de frutos verdes de café arábica**. 2009. 85 f. Tese (Doutorado em Agronomia) Universidade Federal de Lavras, Lavras, MG, 2009.
- ODAJIMA, K.; HAYASHI, Y.; TIANXIA, G.; SETIONO, R. Greedy rule generation from discrete data and its use in neural network rule extraction. **Neural Networks**, v. 21, p. 1020-1028, 2008. DOI: 10.1016/j.neunet.2008.01.003.
- PARDO, M.; SISK, B. C.; SBERVEGLIERI, G.; LEWIS, N. S. Comparison of Fisher's linear discriminant to multilayer perceptron networks in the classification of vapors using sensor array data. **Sensors and Actuators B Chemical**, v. 115, p. 647-655, 2006. DOI: 10.1016/j.snb.2005.10.033.
- PARDO, M.; SBERVEGLIERI, G. Remarks on the use of multilayer perceptrons for the analysis of chemical sensor array data. **IEEE Sensors Journal**, v. 4, n. 3, p. 355-363, 2004. DOI:10.1109/ JSEN.2004.827207.
- PENG, X.; KING, I. Robust BMPM training based on second-order cone programming and its application in medical diagnosis. **Neural Networks**, v. 21, p. 450-457, 2008. DOI: 10.1016/j.neunet.2007.12.051.
- PIMENTA, C. J.; CHALFOUN, S. M.; PEREIRA, M. C.; ANGÉLICO, C. L.; TAVARES, L. S.; MARTINS, R. T. Avaliação físico-química e de qualidade do café (*Coffea arabica* L.) submetido a diferentes tempos de espera para secagem. **Revista Brasileira de Armazenamento**, Viçosa, n.10, p.36-41, 2008. Edição Especial.
- PINTO, F. A. C.; CORRÊA, P. C.; QUEIROZ, D. M.; OLIVEIRA, A. S. C. Utilização de um sistema de visão artificial para estimativa do teor de umidade de frutos de café. **Revista Brasileira de Armazenamento**, Viçosa, n. 6, p. 30-36, 2003. Especial Café.
- RAMÍREZ, M. C. V.; VELHO, H. F. C.; FERREIRA, N. J. Artificial neural network technique for rainfall forecasting applied to the São Paulo region. **Journal of Hydrology**, v. 301, p. 146-162, 2005. DOI: 10.1016/j.jhydrol. 2004.06.028.
- RECAMALES, A. F.; HERNANZ, D.; ÁLVAREZ, C.; GONZÁLEZ-MIRET, M. L.; HEREDIA, FRANCISCO J. Colour of Amontillado wines aged in two

- oak barrel types. **European Food Research and Technology**, v. 224, n. 3, p. 321-327, jan. 2007. DOI: 10.1007/s00217-006-0399-5.
- REINATO, C. H. R.; BORÉM, F. M.; SILVA, PABLO J.; OLIVEIRA, E. C. Influência da secagem, em diferentes tipos de terreiro, sobre a qualidade do café ao longo do armazenamento. **Coffee Science**, Lavras, v. 2, n. 1, p. 48-60, jan.-jun. 2007.
- RIBEIRO, F. C. Análise técnica da utilização do silo bolsa no armazenamento de cafés especiais. Lavras, MG: UFLA, 2009. (Projeto de Pesquisa).
- SABBAGH, N. K.; YOKOMIZO, Y.; FARIA, J. B. Influência da torração nos conteúdos de monossacárides de cafés arábica, robusta e do híbrido lcatu. **Coletânea do ITAL**, Campinas, 8, t.1, p.111-130, 1977.
- SAEG **Sistema para Análises Estatísticas**, Versão 9.1. Viçosa, MG: UFV/Fundação Arthur Bernardes, 2007.
- SOUSA, S. I. V.; MARTINS, F. G.; ALVIM-FERRAZ, M. C. M.; PEREIRA, M. C. Multiple linear regression and artificial neural networks based on principal components to predict ozone concentrations. **Environmental Modeling & Software**, v. 22, p. 97-103, 2007. DOI: 10.1016/j.envsoft.2005.12.002.
- SUCHACZ, B.; WESOLOWSKI, M. The recognition of similarities in trace elements content in medicinal plants using MLP and RBF neural networks. **Talanta**, v. 69, p. 37-42, 2006. DOI: 10.1016/j.talanta. 2005.08.026.
- TAVEIRA, J. H. S. Aspectos fisiológicos e bioquímicos associados à qualidade da bebida de café submetido a diferentes métodos de processamento e secagem. 2009. 67 f. Dissertação (Mestrado em dos Alimentos) Universidade Federal de Lavras, Lavras, MG, 2009.
- TOKATLI, F.; TARI, C.; UNLUTURK, S. M.; BAYSAL, N. G. Modeling of polygalacturonase enzyme activity and biomass production by *Aspergillus sojae ATCC 20235*. **Journal of Industrial Microbiology and Biotechnology**, v. 36, n. 9, p. 1139-1148, sep. 2009. DOI 10.1007/s10295-009-0595-y.
- TOMINAGA, O.; ITO, F.; HANAI, T.; HONDA, H.; KOBAYASHI, T. Sensory Modeling of Coffee with a Fuzzy Neural Network. **Journal of Food Science**, v. 67, n. 1, p. 363-368, 2001.

VERLINDEN, B.; DUFLOU, J. R.; COLLIN, P.; CATTRYSSE, D. Cost estimation for sheet metal parts using multiple regression and artificial neural networks: A case study. **International Journal of Production Economics**, v. 111, p. 484-492, 2008. DOI: 10.1016/j.ijpe. 2007.02.004.

APÊNDICE

Apêndice 1. Análise Estatística

Regressão Linear Múltipla dos dados Equação 4.1

Data 16/06/2009 Si	DE Evandro stema para Anál	Castro	tísticas	-	Hora 09:34:18
Procedimento = Regressão Objetivo = Regressão Dependentes = R	Linear linear simples	s e múltip	la	-	
Independentes = X1	C2 C3	C4	C5	С6	
Estatísticas	Simples				
Nome Média	Desvio padrão				
R 66.5030	6.5675				
X1 506.0000 C2 75.0000	287.0945 38.1850				
C2 75.0000 C3 9.6000	38.1830				
C4 5.7970	2.4215				
C5 2.5000	1.2728				
C6 0.3300	0.1839				
Matriz de Cor	relações	5			
R X		C3	C4	C5	С6
R 1.00000 0.43	735 -0.58148	0.24729	-0.36928	0.48480	-0.19614
X1 0.43735 1.00	0.00000	0.00000	-0.00057	0.00000	0.00000
C2 -0.58148 0.00		0.00000	0.00015	0.00000	0.00000
C3 0.24729 0.00		1.00000	0.00094	0.00000	0.00000
C4 -0.36928 -0.00		0.00094	1.00000		0.00048
C5 0.48480 0.00		0.00000	-0.00078	1.00000	0.00000
C6 -0.19614 0.00 Variável Dependente = R	0.00000	0.00000	0.00048	0.00000	1.00000
Parâmetros da	Regress	são			
Nome Coeficiente	Desvio padrão			Coef. Beta	Probab.
X1 0.100000E-01	0.311836E-10	*****		0.437143	0.0001
C2 -0.100000E+00	0.234454E-09	*****		-0.581422	0.0001
C3 0.500000E+00	0.275229E-08	******		0.247643	0.0001
C4 -0.100000E+01	0.369714E-08	******		-0.368709	0.0001
C5 0.250000E+01 C6 -0.700000E+01	0.703363E-08 0.486944E-07	*****		0.484519	0.0001
CONSTANTE 0.660000E+02	U.400944E-U/			-0.193961	0.0001
0.000000102					
R2 = 1.000000					
R2 ajustado = 1.000000					
Análise de Va	riância				
Fontes de Variação GL	Soma de Quadi		adrado Méd		Signif.
Devido a Regressão 6	673898.1		112316.4	*****	0.0001
Independente ****	-0.1955777E	E-07 0	.1000000E-	-05	
TESTES	0 7110050	3 04			
DURBIN-WATSON = THEIL-NAGAR =		5-04			
Coeficiente RHO T =		z=01			
Coeficiente RHO T-1 =	0.9998351	. 01			
	1.3330001				

Regressão Linear Múltipla dos dados Equação 4.1 + ε

			DEA			-	
Data 16/06/2009	S -	istema pa	Evandro Ca ira Análise		sticas		Hora 09:36:18
_	= Regressão = R		simples e m	últipla X4	X5	 X6	

```
S i m p l e s
Desvio padrão
Estatísticas
Nome Média
                  66.4902
R
                             287.0945
                                  6.6619
                506.0000
X1
                               38.1850
Х2
                 75.0000
                                 3.2528
2.4216
х3
                   9.6000
X4
                  5.8026
                  2.5000
                                 1.2728
0.1839
X 5
X6
 \hbox{\tt Matriz} \quad \hbox{\tt de} \quad \hbox{\tt Correlações} 
          R X1 X2 X3 X4 X5 X6
1.00000 0.43193 -0.57412 0.24448 -0.36573 0.48044 -0.19398
0.43193 1.00000 0.00000 0.00000 -0.00063 0.00000 0.00000
-0.57412 0.00000 1.00000 0.00000 0.00000 0.00000
        R
R
Х1
Х2
          хЗ
X4
        Х5
Х6
Variável Dependente = R
0.0001
                            0.210114E-03
                                                                               0.0001
х3
           0.500816E+00 0.246655E-02 203.042916

-0.100308E+01 0.331324E-02 -302.748535

0.251286E+01 0.630342E-02 398.650691

-0.702880E+01 0.436390E-01 -161.066852
                                                                 0.244534
                                                                               0.0001
          -0.100308E+01
                                                                -0.364614
X4
                                                                               0.0001
                                                                 0.480114 0.0001
      -0.702880E+01
                                                               -0.193980
Х6
                                                                              0.0001
CONSTANTE 0.659798E+02
             = 0.977347
R2 ajustado = 0.977338
R2 ajustado = 0.97/350
A n á l i s e d e V a r i â n c i a
Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif.
Devido a Regressão 6 677693.1 112948.8 ******* 0.0000
Independente
                                  15707.70
                                                      1.005743
```

Regressão Linear Múltipla dos dados Equação 4.1 + 2 ε

	COOUC LII	icai ivi	DE <i>A</i>		os Equaç	740 - 1	
Data 16/06/2009	S	Evandro Castro Sistema para Análises Estatísticas					Hora 09:37:06
Procedimento Objetivo Dependentes	= Regressã = R	o linea:	r simples	-		-	
Independentes		Х2	Х3	X4	X5	Х6	
Estatís Nome R X1 X2 X3 X4 X5 X6 Matriz	Média 66.4895 506.0000 75.0000 9.6000 5.7949 2.5000 0.3300	Desvi	m p 1 e s padrão 6.8702 7.0945 8.1850 3.2528 2.4214 1.2728 0.1839 a ç õ e				
R			X2 °	хЗ	X4	X5	Х6
X1 0. X2 -0. X3 0. X4 -0. X5 0.	55884 0.0 23548 0.0 35096 0.0 46175 0.0 18794 0.0	0000 0000 0000 0075 0000	0.55884 0.00000 1.00000 0.00000 0.00106 0.00000 0.00000	0.23548 0.00000 0.00000 1.00000 0.00008 0.00000 0.00000	0.00075 0.00106 0.00008	0.46175 0.00000 0.00000 0.00000 0.00076 1.00000 0.00000	-0.18794 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 1.00000

```
Parâmetros da Regressão

Nome Coeficiente Desvio padrão Valor de T Coef. Beta Probab.

X1 0.100147E-01 0.560304E-04 178.737808 0.418500 0.0001

X2 -0.100480E+00 0.421266E-03 -238.518433 -0.558471 0.0001

X3 0.497407E+00 0.494529E-02 100.581884 0.235504 0.0001

X4 -0.995750E+00 0.664314E-02 -149.891499 -0.350959 0.0001

X5 0.249374E+01 0.126380E-01 197.321516 0.462012 0.0001

X6 -0.701633E+01 0.874936E-01 -80.192528 -0.187764 0.0001

CONSTANTE 0.660342E+02

R2 = 0.914379

R2 ajustado = 0.914346

A n á l i s e d e V a r i â n c i a

Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif.

Devido a Regressão 6 674307.1 112384.5 ******** 0.0000

Independente **** 63141.44 4.042864
```

Regressão Linear Múltipla dos dados Equação 4.2

Data 16/06/2009 Si	DEA Evandro Castro Sistema para Análises Estatísticas					
Procedimento = Regressão Linear Objetivo = Regressão linear simples e múltipla Dependentes = R						
Independentes = X1 E s t a t i s t i c a s Nome Média R 65.4912 X1 448040.0000 C2 0.7750 C3 1.8200 C4 4.8005 C5 17.0000 C6 1.5600	C2 C3 C4 S i m p l e s Desvio padrão 8.2578 779396.5895 0.6819 1.1789 2.4213 13.7554 0.6830 r e l a ç õ e s	: C5 C	5			
R X1 R 1.00000 0.11 X1 0.11659 1.00 C2 -0.24925 0.00 C3 -0.50822 0.00 C4 0.29690 0.00 C5 0.21637 0.00 C6 -0.62552 0.00 Variável Dependente = R	C2 C3 659 -0.24925 -0.50822 000 0.00000 0.00000 000 1.00000 1.00000 000 -0.00059 -0.00159 000 0.00000 0.00000	0.00000 0.00000 0.00059 0.00000 0.00059 0.00000 0.00059 0.00000 0.00271 1.00000	0.00000 0.00000 0.00000 0.000252 0.00000			
Parâmetros da Nome Coeficiente X1 0.123524E-05 C2 -0.301612E+01 C3 -0.355682E+01 C4 0.100196E+01 C5 0.129419E+00 C6 -0.755434E+01 CONSTANTE 0.785234E+02	Desvio padrão Valor 0.319023E-07 38.7 0.364620E-01 -82.7 0.210922E-01 -168.6 0.102694E-01 97.5	0.293783 95978 0.215579	0.0001 0.0001 0.0001 0.0001 0.0001			
R2 = 0.858402 R2 ajustado = 0.858348 A n á l i s e d e V a Fontes de Variação GL Devido a Regressão 6 Independente *****	riância Soma de Quadrados Q 914563.4 150861.7	quadrado Médio F 152427.2 ***** 9.659473	Signif.			

Regressão Linear Múltipla dos dados Equação 4.2 + ε

Data 16/06/2009	Sistema pa	DEA Evandro ra Análi	Castro	tísticas	-	Hora 09:40:38
Procedimento = Regre Objetivo = Regre Dependentes = R	essão Linear essão linear	simples	e múltip	la	_	
Independentes = X1	C2	C3	C4	C5	C6	
	0					
Estatística Nome Média		p l e s padrão				
R 65.4	913 8.	3099				
X1 448040.0	779396.	5895				
C2 0.7		6819				
C3 1.83		1789				
C4 4.7		4234				
C5 17.0		7554				
C6 1.5		6830				
	Correla					
R	X1 C		C3	C4	C5	C6
R 1.00000			0.50358	0.29347		-0.62078
X1 0.11712			0.00000	-0.00042		0.00000
C2 -0.24720			0.00000	0.00031		0.00000
C3 -0.50358			1.00000	-0.00008		0.00000
			0.00008	1.00000		
C5 0.21482 C6 -0.62078			0.00000	0.00088		0.00000
C6 -0.62078 Variável Dependente		00000	0.00000	-0.00030	0.00000	1.00000
variavei bependence	- K					
Parâmetros	da Reg	ress	ã o			
Nome Coeficie	nte Desvio	padrão	Valor	de T	Coef. Beta	Probab.
X1 0.125006E			37.32		0.117245	0.0001
C2 -0.301346E			-78.72		-0.247293	
C3 -0.354965E			-160.30		-0.503558	0.0001
C4 0.100533E			93.33		0.293178	0.0001
C5 0.129618E			68.30		0.214559	0.0001
C6 -0.755224E		5E-01	-197.59	1294	-0.620690	0.0001
CONSTANTE 0.784818E	+02					
R2 = 0.8458	87					
R2 ajustado = 0.84583						
Análise de	 Variân	cia				
Fontes de Variação		e Quadra	dos Qu	adrado Mé	dio F	Signif.
Devido a Regressão		2624.8		152104.1	*****	_
Independente	**** 16	6272.3		10.64620		

Regressão Linear Múltipla dos dados Equação 4.1 + 2 ε

Data 16/06/2009	DEA Evandro Castro Sistema para Análises Estatísticas					-	Hora 09:41:18
Dependentes Independentes E s t a t í s Nome R	= Regressão = R = X1	C2 Sim Desvio 8. 779396. 0.	C3 ples padrão	e múltipla C4	C5	C6	
C6	1.5600	0.	. 6830				

```
        Matriz
        de
        Correllações

        R
        X1
        C2
        C3
        C4
        C5
        C6

        R
        1.00000
        0.11262
        -0.24123
        -0.49236
        0.28416
        0.21004
        -0.60922

        X1
        0.11262
        1.00000
        0.00000
        0.00000
        0.00000
        0.00000
        0.00000

        C2
        -0.24123
        0.00000
        1.00000
        0.00050
        0.00000
        0.00000

        C3
        -0.49236
        0.00000
        0.00000
        1.00000
        0.00015
        0.00000
        0.00000

        C4
        0.28416
        0.00000
        0.00005
        0.00001
        1.00000
        0.00129
        0.00002

                  0.21004 0.00000 0.00000 0.00129 1.00000 0.00000
-0.60922 0.00000 0.00000 0.00000 0.00026 0.00000 1.00000
 C5
C6
 Variável Dependente = R
 Parâmetros da Regressão
Nome Coeficiente Desvio padrão Valor de T Coef. Beta Probab.
X1 0.122589E-05 0.380320E-07 32.233214 0.112617 0.0001
C2 -0.300292E+01 0.434678E-01 -69.083859 -0.241366 0.0001

      -0.354384E+01
      0.251449E-01
      -140.936793
      -0.492406
      0.0001

      0.997552E+00
      0.122617E-01
      81.355350
      0.284240
      0.0001

      0.129325E+00
      0.215493E-02
      60.013383
      0.209675
      0.0001

      -0.75691E+01
      0.434025E-01
      -174.393228
      -0.609297
      0.0001

 C3
                              -0.354384E+01
 C4
 C5
 C6
 CONSTANTE 0.745849E+02
 R2
                                     = 0.809356
 R2 ajustado = 0.809283
A n á l i s e d e V a r i â n c i a
Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif.
Devido a Regressão 6 910227.1 151704.5 ******** 0.0000
Independente **** 214404.5 13.72804
```

Leitura dos resultados Análises Química e Sensorial

		DEA		
Data		Evandro Castro		Hora
22/09/2009		Regressao		08:20:46
DESCRI	ÇÃO DO	ARQUIVO		
Tipo de Lei	tura -	Microsoft Excel		
Variáveis	Mínimos	Máximos	Perdidos	Válidos
ARD	0.1500000	0.7100000	0	413
ANR	1.950000	10.38000	0	413
POL	3.420000	7.900000	0	413
ATT	115.8300	255.0000	0	413
CEL	36.76000	297.0000	0	413
LPO	24.18000	91.71000	0	413
ASE	44.00000	82.00000	0	413
01 ~	G 1	41.0		
,	Gravadas			
	otais			
Valores Per	didos	0		

Regressão Linear Simples ASE = f(ARd)

Objetivo = Regressão linear simples e múltipla

Procedimento = Regressão Linear

```
Dependentes = ASE
Independentes = ARD
                     Simples
Estatísticas
                     Desvio padrão
            Média
             69.9803
ASE
                          12.0123
             0.3809
ARD
                          0.1232
Matriz de Correlações
                  ARD
         ASE
         1.00000 -0.37371
ASE
ARD
        -0.37371 1.00000
Variável Dependente = ASE
Parâmetros da Regressão
Nome Coeficiente Desvio padrão Valor de T Coef. Beta Probab.
ARD -0.364338E+02 0.446054E+01 -8.168027 -0.373708 0.0001
CONSTANTE 0.838569E+02
R2
         = 0.139657
R2 \text{ ajustado} = 0.137564
Análise de Variância
Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif.
Devido a Regressão 1 8302.655 8302.655 66.72 0.0000
Independente 411
                      51147.51
                                   124.4465
            Regressão Linear Simples ASE = f(AnR)
Procedimento = Regressão Linear
         = Regressão linear simples e múltipla
Objetivo
Dependentes = ASE
Independentes = ANR
Estatísticas Simples
Nome
            Média
                     Desvio padrão
                     12.0123
ASE
             69.9803
ANR
             6.5125
                          1.5987
Matriz de Correlações
         ASE
                 ANR
ASE
         1.00000 0.29422
        0.29422 1.00000
Variável Dependente = ASE
Parâmetros da Regressão
Nome Coeficiente Desvio padrão Valor de T Coef. Beta Probab.
ANR 0.221072E+01 0.354228E+00 6.240937
                                      0.294217
CONSTANTE 0.555830E+02
         = 0.086564
R2 \text{ ajustado} = 0.084341
Análise de Variância
Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif. Devido a Regressão 1 5146.228 5146.228 38.95 0.0000
             411 54303.93
                                     132.1264
Independente
```

Regressão Linear Simples ASE = f(Pol)

Procedimento = Regressão Linear

```
= Regressão linear simples e múltipla
Objetivo
Dependentes = ASE
Independentes = POL
                     Simples
Estatísticas
                     Desvio padrão
            Média
             69.9803
ASE
                          12.0123
              6.1007
POL
                          0.8336
Matriz de Correlações
                  POL
         ASE
         1.00000 -0.37054
ASE
POL
        -0.37054 1.00000
Variável Dependente = ASE
Parâmetros da Regressão
Nome Coeficiente Desvio padrão Valor de T Coef. Beta Probab. POL -0.533970E+01 0.660223E+00 -8.087717 -0.370540 0.0001
CONSTANTE 0.102556E+03
R2
         = 0.137300
R2 \text{ ajustado} = 0.135201
Análise de Variância
Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif.
Devido a Regressão 1 8162.496 8162.496 65.41 0.0000
Independente 411
                     51287.67
                                    124.7875
            Regressão Linear Simples ASE = f(ATT)
Procedimento = Regressão Linear
Objetivo
         = Regressão linear simples e múltipla
Dependentes = ASE
Independentes = ATT
Estatísticas Simples
Nome
            Média
                     Desvio padrão
                     12.0123
ASE
             69.9803
ATT
            200.4497
                         24.0243
Matriz de Correlações
        ASE
                 ATT
ASE
        1.00000 -0.51743
        -0.51743 1.00000
Variável Dependente = ASE
Parâmetros da Regressão
Nome Coeficiente Desvio padrão Valor de T Coef. Beta Probab.
ATT -0.258718E+00 0.211053E-01 -12.258436 -0.517427
                                                  0.0001
CONSTANTE 0.121840E+03
         = 0.267731
R2 \text{ ajustado} = 0.265949
Análise de Variância
Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif.
Devido a Regressão 1 15916.66 15916.66 150.27 0.0000
Independente 411
                      43533.50
                                    105.9209
```

Regressão Linear Simples ASE = f(CEI)

```
Procedimento = Regressão Linear
           = Regressão linear simples e múltipla
Objetivo
Dependentes = ASE
Independentes = CEL
Estatísticas Simples
                      Desvio padrão
            Média
             69.9803
ASE
            155.9102
                          12.0123
CEL
                          49.8011
Matriz de Correlações
                  CEL
         ASE
         1.00000 -0.73570
ASE
        -0.73570 1.00000
CEL
Variável Dependente = ASE
Parâmetros da Regressão
Nome Coeficiente Desvio padrão Valor de T Coef. Beta Probab.
CEL -0.177456E+00 0.805846E-02 -22.021085 -0.735702 0.0001
CONSTANTE 0.976475E+02
R2
          = 0.541258
R2 \text{ ajustado} = 0.540142
Análise de Variância
Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif.
Devido a Regressão 1 32177.87 32177.87 484.93 0.0000
                                      66.35595
Independente 411
                      27272.29
            Regressão Linear Simples ASE = f(LPo)
Procedimento = Regressão Linear
Objetivo = Regressão linear simples e múltipla
Dependentes = ASE
Independentes = LPO
Estatísticas
                      Simples
            Média
                     Desvio padrão
Nome
                     12.0123
ASE
             69.9803
LPO
             42.0599
                          13.2269
Matriz de Correlações
        ASE
                 LPO
ASE
         1.00000 -0.53916
                 1.00000
LPO
        -0.53916
Variável Dependente = ASE
Parâmetros da Regressão
Nome Coeficiente Desvio padrão Valor de T Coef. Beta Probab.
LPO -0.489655E+00 0.377279E-01 -12.978578 -0.539165 0.0001
CONSTANTE 0.905751E+02
R2
          = 0.290699
R2 \text{ ajustado} = 0.288973
Análise de Variância
Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif.
Devido a Regressão 1 17282.09 17282.09 168.44 0.0000 Independente 411 42168.08 102.5987
```

Regressão Linear Múltipla ASE = f(ATT, CEI, LPo)

```
Procedimento = Regressão Linear
Objetivo = Regressão linear simples e múltipla
Dependentes = ASE
Independentes = ATT
                     CEL
                                  LPO
                       Simples
Estatísticas
              Média
                        Desvio padrão
ASE
               69.9803
                             12.0123
ATT
              200.4497
                             24.0243
CEL
              155.9102
                             49.8011
LPO
               42.0599
                            13.2269
Matriz de Correlações
         ASE
                   ATT CEL LPO
          1.00000 -0.51743 -0.73570 -0.53916
ASE

      -0.51743
      1.00000
      0.53285
      0.26295

      -0.73570
      0.53285
      1.00000
      0.64729

ATT
CEL
LPO
         -0.53916 0.26295 0.64729 1.00000
Variável Dependente = ASE
Parâmetros da Regressão
Nome Coeficiente Desvio padrão Valor de T Coef. Beta Probab.
ATT -0.953072E-01 0.192329E-01 -4.955430 -0.190611 0.0001
CEL -0.131843E+00 0.117437E-01 -11.226750 -0.546599 0.0001
LPO -0.122815E+00 0.387811E-01 -3.166883 -0.135233 0.0008
CONSTANTE 0.114806E+03
R2
         = 0.573675
R2 ajustado = 0.570548
Análise de Variância
Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif.
Devido a Regressão 3 34105.05 11368.35 183.45 0.0000
Independente 409
                         25345.11
                                           61.96849
TESTES
DURBIN-WATSON
                             1.046431
THEIL-NAGAR
                            0.4769184
Coeficiente RHO T = Coeficiente RHO T-1 =
                            0.8475147
                           0.4483559
Variável Dependente = ASE
Após a Retirada de = LPO
Parâmetros da Regressão
Nome Coeficiente Desvio padrão Valor de T Coef. Beta Probab.
CEL -0.154947E+00 0.930359E-02 -16.654513 -0.642383 0.0001
ATT -0.875678E-01 0.192859E-01 -4.540511 -0.175132 0.0001
CONSTANTE 0.111691E+03
          = 0.563221
R2 ajustado = 0.561090
```

Análise de Variância

Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif. Devido a Regressão 2 33483.56 16741.78 264.34 0.0000 Independente 410 25966.60 63.33318

T E S T E S

DURBIN-WATSON = 1.063564

THEIL-NAGAR = 0.4682911

Coeficiente RHO T = -0.5617717E-01

Coeficiente RHO T-1 = 0.4582044

Análise de Variância para a Eliminação Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif. Efeito da retirada 409 621.4911 61.96849 3.34 0.1740 Modelo Anterior 3 25966.60 63.33318

Variável Dependente = ASE Após a Retirada de = ATT

Parâmetros da Regressão Nome Coeficiente Desvio padrão Valor de T Coef. Beta Probab. CEL -0.177456E+00 0.805846E-02 -22.021085 -0.735702 0.0001 CONSTANTE 0.976475E+02

R2 = 0.541258R2 ajustado = 0.540142

A n á l i s e d e V a r i â n c i a

Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif.

Devido a Regressão 1 32177.87 32177.87 484.93 0.0000

Independente 411 27272.29 66.35595

TESTES

 DURBIN-WATSON
 =
 0.2857451

 THEIL-NAGAR
 =
 0.8571676

 Coeficiente RHO T
 =
 2.593358

 Coeficiente RHO T-1
 =
 0.7480323

Análise de Variância para a Eliminação Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif. Efeito da retirada 3 1305.692 63.33318 10.31 0.0897 Modelo Anterior 2 27272.29 66.35595

Regressão Linear Múltipla ASE = f(ARd, AnR, Pol, ATT, CEI, LPo)

```
Procedimento = Regressão Linear
Objetivo = Regressão linear simples e múltipla
Dependentes = ASE
Independentes = ARD
                  ANR POL
                                  ATT
                                          CEL LPO
Estatísticas Simples
             Média
                       Desvio padrão
ASE
              69.9803
                         12.0123
ARD
               0.3809
                           0.1232
                           1.5987
               6.5125
ANR
POL
               6.1007
                           0.8336
ATT
             200.4497
                          24.0243
CEL
             155.9102
                          49.8011
LPO
             42.0599
                          13.2269
Matriz de Correlações
    ASE ARD ANR POL ATT CEL LPO
ASE 1.00000 -0.37371 0.29422 -0.37054 -0.51743 -0.73570 -0.53916
ARD -0.37371 1.00000 0.22865 0.32837 0.16341 0.08336 0.05153
ANR 0.29422 0.22865 1.00000 0.31093 0.02131 -0.52580 -0.43531
POL -0.37054 0.32837 0.31093 1.00000 0.40106 0.21139 0.36306
ATT -0.51743 0.16341 0.02131 0.40106 1.00000 0.53285 0.26295
CEL -0.73570 0.08336 -0.52580 0.21139 0.53285 1.00000 0.64729
LPO -0.53916 0.05153 -0.43531 0.36306 0.26295 0.64729 1.00000
Variável Dependente = ASE
Parâmetros da Regressão
Nome Coeficiente Desvio padrão Valor de T Coef. Beta Probab.
ARD -0.280864E+02 0.301377E+01 -9.319330 -0.28808 0.0001
ANR 0.707124E+00 0.328283E+00
                              2.154009 0.094109
                                                  0.0156
POL -0.171888E+01 0.571789E+00 -3.006141 -0.119279 0.0013
ATT -0.631717E-01 0.191830E-01 -3.293109 -0.126341 0.0005
CEL -0.127175E+00 0.121616E-01 -10.457090 -0.527244 0.0001
LPO -0.595256E-01 0.390355E-01 -1.524909 -0.065544 0.0636
CONSTANTE 0.121553E+03
         = 0.668152
R2 \text{ ajustado} = 0.663248
Análise de Variância
Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif.
Devido a Regressão 6 39721.74 6620.290 136.24 0.0000
Independente 406 19728.42
                                      48.59217
TESTES
DURBIN-WATSON
                    =
                          0.2015498E-01
                    =
                          0.9904914
THEIL-NAGAR
THEIL-NAGAR = 0.9904914

Coeficiente RHO T = 557.0811

Coeficiente RHO T-1 = 0.8800392
Variável Dependente = ASE
Após a Retirada de = LPO
```

Parâmetros da Regressão Nome Coeficiente Desvio padrão Valor de T Coef. Beta Probab. CEL -0.134780E+00 0.111100E-01 -12.131416 -0.558773 0.0001 ARD -0.278643E+02 0.301515E+01 -9.241439 -0.285809 0.0001 ATT -0.581500E-01 0.189290E-01 -3.072011 -0.116298 0.0011 POL -0.212401E+01 0.507143E+00 -4.188189 -0.147392 0.0001 ANR 0.857104E+00 0.313713E+00 2.732130 0.114069 0.0031 CONSTANTE 0.120639E+03 = 0.666251R2 R2 ajustado = 0.662151Análise de Variância Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif. Devido a Regressão 5 39608.75 7921.750 162.50 0.0000 Independente 407 19841.41 48.75040 TESTES

 DURBIN-WATSON
 =
 0.1105304E-01

 THEIL-NAGAR
 =
 0.9948916

 Coeficiente RHO T
 =
 128.0242

 Coeficiente RHO T-1
 =
 0.6803505

 Análise de Variância para a Eliminação Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif. Efeito da retirada 406 112.9937 48.59217 0.39 ******
Modelo Anterior 6 19841.41 48.75040 Variável Dependente = ASE Após a Retirada de = ANR Parâmetros da Regressão Nome Coeficiente Desvio padrão Valor de T Coef. Beta Probab.

 CEL
 -0.155371E+00
 0.822702E-02
 -18.885464
 -0.644142
 0.0001

 ARD
 -0.262640E+02
 0.298105E+01
 -8.810328
 -0.269394
 0.0001

 POL
 -0.160915E+01
 0.474547E+00
 -3.390925
 -0.111665
 0.0003

 ATT
 -0.426953E-01
 0.182065E-01
 -2.345051
 -0.085389
 0.0095

 CONSTANTE 0.122583E+03 = 0.660130R2 ajustado = 0.656798Análise de Variância Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif. Devido a Regressão 4 39244.85 9811.212 198.11 0.0000 Independente 408 20205.31 49.52283 TESTES

 DURBIN-WATSON
 =
 0.4186535

 THEIL-NAGAR
 =
 0.7909322

 Coeficiente RHO T
 =
 3.372066

 Coeficiente RHO T-1
 =
 0.6291964

 Análise de Variância para a Eliminação Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif. Efeito da retirada 6 363.8991 48.75040 1.49 0.3384 Modelo Anterior 5 20205.31 49.52283

Variável Dependente = ASE Após a Retirada de = ATT

Parâmetros da Regressão Nome Coeficiente Desvio padrão Valor de T Coef. Beta Probab. CEL -0.165023E+00 0.716255E-02 -23.039703 -0.684157 0.0001 ARD -0.264990E+02 0.299571E+01 -8.845647 -0.271804 0.0001 POL -0.196936E+01 0.451463E+00 -4.362181 -0.136661 0.0001 CONSTANTE 0.117816E+03 = 0.655549R2 R2 ajustado = 0.653023Análise de Variância Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif. Devido a Regressão 3 38972.51 12990.84 259.47 0.0000 Independente 409 20477.65 50.06761 TESTES

 DURBIN-WATSON
 =
 0.3887892

 THEIL-NAGAR
 =
 0.8057713

 Coeficiente RHO T
 =
 3.394383

 Coeficiente RHO T-1
 =
 0.6485069

 Análise de Variância para a Eliminação Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif. Efeito da retirada 5 272.3391 49.52283 1.37 0.3901 Modelo Anterior 4 20477.65 50.06761 Variável Dependente = ASE Após a Retirada de = POL Parâmetros da Regressão Nome Coeficiente Desvio padrão Valor de T Coef. Beta Probab. CEL -0.171131E+00 0.717710E-02 -23.844081 -0.709481 0.0001 ARD -0.306682E+02 0.290090E+01 -10.571949 -0.314569 0.0001 CONSTANTE 0.108342E+03 = 0.639524R2 ajustado = 0.637765Análise de Variância Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif. Devido a Regressão 2 38019.79 19009.90 363.69 0.0000 Independente 410 21430.37 52.26920 TESTES

 DURBIN-WATSON
 =
 0.3892647

 THEIL-NAGAR
 =
 0.8054594

 Coeficiente RHO T
 =
 3.543902

 Coeficiente RHO T-1
 =
 0.6461844

 Análise de Variância para a Eliminação Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif. Efeito da retirada 4 952.7175 50.06761 6.34 0.0805 Modelo Anterior 3 21430.37 52.26920

Variável Dependente = ASE Após a Retirada de = ARD

Parâmetros da Regressão Nome Coeficiente Desvio padrão Valor de T Coef. Beta Probab. CEL -0.177456E+00 0.805846E-02 -22.021085 -0.735702 0.0001 CONSTANTE 0.976475E+02

R2 = 0.541258R2 ajustado = 0.540142

A n á l i s e d e V a r i â n c i a Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif. Devido a Regressão 1 32177.87 32177.87 484.93 0.0000 Independente 411 27272.29 66.35595

T E S T E S

DURBIN-WATSON = 0.2857451

THEIL-NAGAR = 0.8571676

Coeficiente RHO T = 2.593358

Coeficiente RHO T-1 = 0.7480323

Análise de Variância para a Eliminação Fontes de Variação GL Soma de Quadrados Quadrado Médio F Signif. Efeito da retirada 3 5841.924 52.26920 55.88 0.0176 Modelo Anterior 2 27272.29 66.35595

*** Atenção *** Variável com efeito Significativo