

## Modelo matemático para estimar o pH de uvas com espectroscopia do infravermelho próximo

Arthur Ludwig Fagundes da Silva<sup>(1)</sup>, Leo Duc Haa Carson Schwartzhaupt da Conceição<sup>(2)</sup>, Hannes Fischer<sup>(3)</sup> e Marcelo Lazzarotto<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup> Bolsista, Embrapa Uva e Vinho, Bento Gonçalves, RS. <sup>(2)</sup> Pesquisadores, Embrapa Uva e Vinho, RS.

<sup>(3)</sup> Professor associado, Faculdade de Tecnologia de São Paulo, SP.

**Resumo** – A espectroscopia do infravermelho próximo (NIRS) é uma técnica que permite analisar a composição química de substâncias como a atividade de íons hidrônio (pH). Esse método possui eficiência, baixo custo e não é destrutivo. O objetivo do trabalho foi desenvolver um modelo para ser utilizado na estimativa do pH de bagas de uva com utilização do NIRS. Foram avaliados 30 vinhedos das cidades de Bento Gonçalves, Flores da Cunha, Monte Belo do Sul e Veranópolis, RS. Os espectros de NIRS foram gerados utilizando  $\lambda = 900$  a 1660 nm, em  $30 \pm 1$  bagas de uva por vinhedo e calculados os espectros médios. O modelo foi construído com 20 amostras [validação interna (VI)] usando mínimos múltiplos quadrados (PLS) como tratamento estatístico [com remoção de tendência (*Detrending* e terceira derivada com filtro Savitzky Golay)]. Este modelo foi validado com 10 amostras [validação externa (VE)] não usadas na construção da curva de calibração. A avaliação da qualidade do modelo foi usando a razão de desempenho do desvio (RPD). No grupo VI estavam 30% 'Cabernet Franc', 25% 'Chardonnay' e 45% de outras variedades. No grupo VE estavam 30% 'Cabernet Franc', 30% 'Chardonnay' e 40% de outras variedades. O modelo VI apresentou um  $R^2 = 0,75$  com um erro de validação cruzada de 0,09 para um pH médio de 3,36. O erro padrão de predição encontrado foi de 0,08 com um  $R^2 = 0,77$  e o RDP foi de 2,07. Com este resultado é possível estimar o pH de uvas a partir da curva construída neste trabalho, trazendo maior rapidez analítica e demandando menor preparo de amostras.

Termos para indexação: atividade íon hidrônio, análise não destrutiva, quimiometria.