



Caracterización de jugos de uva comerciales en base al perfil mineral y análisis quimiométrico no supervisado

Brenda V. Canizo^a, Ana Laura Diedrichs^b, Agustín Londonio^c, Patricia Smichowski^c, Roberto G. Pellerano^{d*} y Rodolfo G. Wuilloud^a

^aLaboratorio de Química Analítica para Investigación y Desarrollo (QUIANID), Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Cuyo, Instituto Interdisciplinario de Ciencias Básicas (ICB), FCEN, UNCUYO-CONICET, Mendoza, Argentina, 5500.

^bLaboratorio DHARMA, Departamento Sistemas de Información, FRM-UTN, Mendoza, Argentina, 5500.

^cComisión Nacional de Energía Atómica, Gerencia Química, San Martín, Buenos Aires, Argentina.

^dInstituto de Química Básica y Aplicada del Nordeste Argentino (IQUIBA-NEA), UNNE-CONICET, Corrientes, Argentina, 3400.

* e-mail: roberto.pellerano@comunidad.unne.edu.ar

Actualmente el consumo de alimentos y bebidas naturales, libres de conservantes, ha aumentado significativamente. El jugo de uva es una bebida derivada del género *Vitis sp.*, principalmente de *V. vinifera*, la cual presenta sustancias bioactivas de origen fenólico con propiedades oxidantes, cardioprotectoras y antiinflamatorias¹. La identificación del origen geográfico de alimentos y bebidas es actualmente un aspecto relevante a la hora de identificar la calidad y autenticidad de un producto. En este contexto, el objetivo de este trabajo se propuso caracterizar jugos de uva comerciales de tres países de Sudamérica (Argentina, Brasil y Chile), principales productores y exportadores de este producto, utilizando técnicas de reconocimiento de pautas no supervisadas, en base a su perfil mineral. Se determinaron por espectrometría de masas con plasma acoplado inductivamente 11 elementos: As, Cr, Cu, Fe, Mn, Mo, Ni, Pd, Rb, V, Y en 31 muestras de jugos comerciales de uva. Las muestras se agruparon de acuerdo al país en el que fueron adquiridas, 16 de Argentina (ARG), 5 de Chile (CHL) y 10 de Brasil (BRZ). En primer término, previo al análisis multielemental se mineralizaron las muestras mediante digestión ácida en vaso abierto con HNO₃ (65%) de elevada pureza. La calidad del método analítico se evaluó mediante el método de adición de estándar. Una vez obtenidos los resultados se distribuyeron siguiendo un arreglo matricial en el que se ubicaron en las filas a las muestras y las concentraciones elementales en las columnas.

Para el análisis quimiométrico de los resultados se utilizaron distintas técnicas de reconocimiento de pautas no supervisadas: análisis de componentes principales (ACP), análisis de conglomerados k-medias (kM). Previo al análisis quimiométrico, los datos fueron estandarizados para evitar problemas de dimensionalidad. El ACP reveló diferencias en la composición mineral de las muestras provenientes de ARG, caracterizadas por elevados contenidos de Fe, Mn y Cu. Las muestras de BRZ y CHL presentaron gran superposición entre los autovalores correspondientes, indicando una gran similitud composicional entre las mismas. Por su parte, el método kM generó resultados congruentes con los observados en el ACP. El método de agrupación kM es un método iterativo en los que la noción de similitud se deriva de la proximidad de un punto de datos al centroide de los agrupamientos. Esta metodología requiere que se suministre de antemano el número de grupos esperados en la matriz de datos (valor *k*). Se ensayaron distintos valores para el valor *k*, lográndose resultados óptimos al utilizar *k* = 3 con un 94% de exactitud global, se utilizó validación cruzada (*k-fold* = 15) para evitar falsos resultados por sobreajuste.

¹Granato, D., de Magalhães Carrapeiro, M., Fogliano, V., & van Ruth, S. M., Trends in Food Science and Technology, 52 (2016), 31–48.