



IV ESCOLA DE INVERNO
DE QUIMIOMETRIA

IV Winter School of Chemometrics

20 a 23
AGOSTO 2019

PORTO
ALEGRE/RS

Programação Científica e Livro de Resumos

Scientific Program and Book of Abstracts



www.iq.ufrgs.br/eqi/



HERRAMIENTAS QUIMIOMETRICAS PARA LA CLASIFICACION DE GRANOS DE SOJA

Diana C. Fechner^a, Olivia del Valle Bulacios Muñiz^b, Eduardo J. Marchevsky^c, , Roberto G. Pellerano^a, Melisa J. Hidalgo^{a*}

^a Instituto de Química Básica y Aplicada del Nordeste Argentino (IQUIBA-NEA), Av. Libertad 5470 (3400), Corrientes, Argentina.

^b Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UNCA, Av. Belgrano 300 (K4700), Catamarca, Argentina.

^c Instituto de Química de San Luis (INQUISAL), Av. Ejército de los Andes 950 (5700), San Luis, Argentina.

*e-mail: melujaz@gmail.com

En el campo agroalimentario, las técnicas analíticas instrumentales son utilizados para verificar la calidad e idoneidad de los productos y los medios de producción, o para comprobar la veracidad de la información suministrada en las etiquetas. Se puede afirmar que la calidad de los alimentos es un aspecto diferenciador en los mercados, ya que los consumidores ponen atención a determinados atributos de calidad de los productos, dándoles cada vez más valor a la procedencia geográfica. En este trabajo se llevó a cabo el análisis de elementos trazas en granos de soja combinado con herramientas quimiométricas para caracterizar los orígenes geográficos de los granos. Se analizaron un total de 120 muestras de granos de soja producidos en tres zonas productoras de las provincias de San Luis, Chaco y Córdoba de Argentina. Luego de la recolección de los granos, cada muestra fue lavada y procesada con agua desionizada. Posteriormente se procedió a una digestión húmeda (HNO_3 y H_2O_2) para su mineralización sobre plancha calefactora en vaso abierto. Se determinaron 25 elementos a nivel de vestigios incluyendo tierras raras mediante espectrometría de masa por plasma acoplado inductivamente (IPC-MS). Para el análisis de los resultados se trabajó con el software Python con paquetes adecuados para el análisis de datos. Se utilizaron distintas técnicas de análisis quimiométricas (LDA y PLS-DA) como así también técnicas de minería de datos (SMV-DA y Random Forest). Los métodos aplicados fueron comparados teniendo en cuenta la exactitud global y el área bajo la curva determinados por validación cruzada en grupos ($k=10$). El mejor desempeño se pudo observar en el método de SVM-DA después de optimizar los parámetros gamma y C del kernel RBF. Los resultados obtenidos permitieron alcanzar un 95,3% de acierto en la procedencia de las muestras, quedando demostrado que existen diferencias en los contenidos elementales que resultan útiles para la elaboración de modelos de origen geográfico.

[Al CONICET y a la FaCENA (UNNE) de Argentina]