



XI Congreso Argentino **QUÍMICA ANALÍTICA**

Corrientes / Argentina 2021

LIBRO DE RESÚMENES

XI Congreso Argentino de Química Analítica
30 de Noviembre al 03 de Diciembre 2021
Corrientes - Argentina
Modalidad Virtual

Congreso Argentino de Química Analítica

XI Congreso Argentino de Química Analítica : libro de resúmenes / compilación de Sergio Sebastián Samoluk ; César Adrián Lezcano ; coordinación general de Juan Daniel Ruíz Díaz ; dirigido por Roberto Gerardo Pellerano ; editado por Melisa Jazmin Hidalgo; Roxana María Itatí Goyechea ; Adriana Lucía Moresi ; Diana Corina Fechner y Michael Pérez Rodríguez ; ilustrado por Romina Paola Romero. - 1a ed compendiada. - Paso de la Patria : Roberto Gerardo Pellerano, 2022.

Libro digital, PDF

Archivo Digital: descarga y online

ISBN 978-987-88-5110-5

1. Química Analítica. I. Samoluk, Sergio Sebastián, comp. II. Lezcano, César Adrián, comp. III. Ruíz Díaz, Juan Daniel, coord. IV. Pellerano, Roberto Gerardo, dir. V. Hidalgo, Melisa Jazmin, ed. VI. Romero, Romina Paola, ilus. VII. Título.

CDD 543.1

XI CONGRESO ARGENTINO
DE QUÍMICA ANALÍTICA
LIBRO DE RESUMENES

30 de Noviembre al 03 de Diciembre 2021
Corrientes - Argentina

Composición mineral y modelos para determinar identidad de jugos de naranjas producidas en la región Nordeste Argentina

José E. Gaiad, Lezcano Cesar A., Lucía A. Moresi,
Roberto G. Pellerano y Melisa J. Hidalgo*

Instituto de Química Básica y Aplicada del Nordeste Argentino (IQUIBA – NEA), Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, Universidad Nacional del Nordeste, Capital, Corrientes, Argentina.
* e-mail: melujaz@gmail.com

Los cítricos producidos en nuestro país permiten abastecer la demanda interna durante todo el año como así también permite realizar exportaciones a diferentes mercados. En este sentido, dadas las exigencias de los mercados de exportación, se ha implementado el sistema registral SITC con el fin de lograr la trazabilidad de los cítricos producidos. El mismo se basa en información documental y no contempla mecanismos que permitan comprobar la identidad física de las muestras en cualquier etapa de la cadena productiva, por lo que éstas pueden ser vulnerables a contaminación o adulteración. Resolver este problema implica la necesidad de contar con un mecanismo de identificación de las muestras físicas, que podría estar basado en la composición química de las mismas. La influencia de las condiciones locales en la composición de los tejidos vegetales ha permitido que la determinación de los contenidos de elementos haya sido propuesta para determinar el origen geográfico de las muestras. En este marco, el objetivo de este trabajo fue la utilización de información química del contenido multielemental en muestras de jugo de naranja de las variedades ‘Salustiana’ y ‘Valencia late’, para obtener modelos de clasificación adecuados a efectos de analizar orígenes de jugo de naranja de diferentes zonas productoras del nordeste argentino (NEA).

Para ello se utilizó la información obtenida mediante espectroscopía de absorción atómica de llama (FAAS) para los elementos Ca, K, Fe, Mg, Mn, Na y Zn y por espectroscopia de emisión óptica con plasma acoplado inductivamente (ICP-OES) para los elementos Al, Ba, Ca, Cd, Co, Cr, Cu, Fe, K, Mg, Mn, Mo, Ni, Pb, Sb, Se, Sr y Zn. Se dividió por zona de producción, en cuatro estratos: Noreste de la provincia de Entre Ríos (NEER); sureste de la provincia de Corrientes (SECR); centro oeste de la provincia de Corrientes (COCR); centro-sur de la provincia de Misiones (CSMN). Se empleó un método de muestreo al azar sistemático para seleccionar las plantas, de las que se extrajeron 10 frutos por planta, que conformaron la unidad muestral y se procesaron conjuntamente (n=97). Posteriormente, a los efectos de estudiar posibles diferencias o similitudes en la composición mineral de los jugos de naranja entre las diferentes zonas de producción, se realizó un análisis de componentes principales (PCA). A continuación, se utilizaron tres técnicas de clasificación a fin de obtener modelos que nos permitan conocer origen de los jugos: análisis lineal discriminante (LDA), K-vecinos más cercanos (K-NN) y máquinas de vectores soporte (SVM). Se dividió el conjunto de datos en un subconjunto de entrenamiento, constituido por el 60% de los datos y un subconjunto de prueba, conformado por el 40% restante. El subconjunto de entrenamiento se utilizó para la definición de los modelos y la optimización de los parámetros. En el caso del LDA, esta técnica permitió clasificar los jugos de naranja según su origen geográfico con una precisión del 96% y un índice κ (kappa) = 0,95 (FAAS) y una precisión del 98% y un índice κ = 0,98 (ICP-OES). En la Figura 1, se observa la distribución de las muestras teniendo en cuenta los contenidos de Ca, K, Fe, Mg, Mn, Na y Zn.

Para la técnica K-NN, se obtuvieron los mejores resultados con 5 vecinos más cercanos, con una precisión de 67% e índice κ = 0,55 (FAAS) y 15 vecinos más cercanos, con una precisión de 74% e índice κ = 0,66 (ICP-OES). Por otra parte, para la técnica de SVM se seleccionaron, por ser los de mejor comportamiento, los siguientes modelos, kernel polinomial de grado 2 y $c = 1$, con una precisión general del 90% y un índice κ de 0,87 (FAAS), y kernel polinomial de grado 3 y $c = 1$, con una precisión general del 99% y un índice κ de 0,99 (ICP-OES). Cuando se trabajó con datos obtenidos por medio de FAAS, de las 3 técnicas de clasificación probadas, el rendimiento de LDA fue el mejor, con una tasa de éxito del 96 % en el conjunto de prueba, seguido de SVM con 90%, y finalmente KNN con 67%. Con datos obtenidos por medio del ICP-OES, de las 3 técnicas de clasificación probadas, el rendimiento de las SVM fue el mejor, con una tasa de éxito del 99 % en el conjunto de prueba, seguido de LDA con 98% y finalmente KNN con 74%.

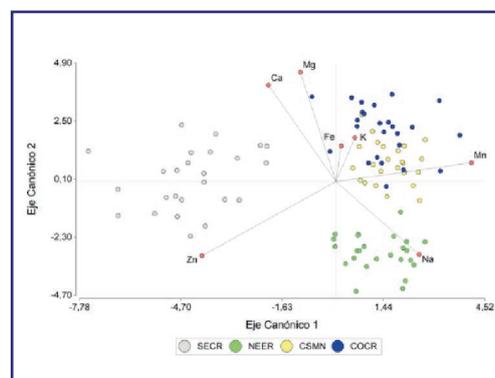


Figura 1. Proyección de las muestras en el espacio generado por las dos primeras funciones discriminantes.