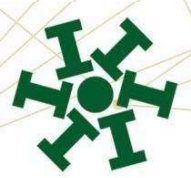




DOSMIL
23

XII CONGRESO ARGENTINO
QUÍMICA ANALÍTICA
San Juan • Argentina

LIBRO DE RESÚMENES



Maratta, Ariel

XII Congreso Argentino de Química Analítica / Ariel Maratta ; compilación de Brian Carrizo ; Melisa Lepez ; Sebastian Carrera. - 1a ed. - San Juan : Universidad Nacional de San Juan. Facultad de Filosofía, Humanidades y Artes, 2023.

Libro digital, PDF

Archivo Digital: descarga y online

ISBN 978-950-605-937-8

1. Química. 2. Química Analítica. I. Carrizo, Brian, comp. II. Lepez, Melisa, comp. III. Carrera, Sebastian, comp. IV. Título.

CDD 543.007

ISBN 978-950-605-937-8



Autenticación geográfica de té argentinos mediante la espectroscopía del infrarrojo cercano (NIR) y herramientas quimiométricas

Fechner Diana C^{a,b,c}, Martínez Ramón^{b,c}, Hidalgo Melisa J^{a*}, Goicoechea Héctor C^d,
Pellerano Roberto G^a

^a IQUIBA-NEA (UNNE-CONICET), FaCENA (UNNE), Corrientes, Argentina, 3400.

^b CIT Río Negro (UNRN-CONICET), Villa Regina, Río Negro, Argentina, 8336.

^c UNRN, Villa Regina, Río Negro, Argentina, 8336.

^d LADAQ, FCBF (UNL), Santa Fe, Santa Fe, Argentina, 3000.

* e-mail: melujaz1806@gmail.com

El consumo de té es muy popular en todo el mundo, en relación con dicho consumo se han reportado diversos beneficios para la salud, tales como efectos antiinflamatorios, antimicrobianos y antivirales, entre otros. A nivel mundial, Argentina es un importante exportador de té, junto con los principales países productores como Kenia, Sri Lanka, China e India. A nivel regional, Argentina, Brasil y Paraguay, concentran las principales áreas de este cultivo en Sudamérica. Uno de los desafíos que se presentan al momento de lograr modelos de autenticación del té argentino es la gran similitud de condiciones agroclimáticas en las zonas productoras de estos tres países, lo que dificulta contar con marcadores químicos específicos de origen geográfico. En este sentido, la espectroscopía del infrarrojo cercano (NIR) junto con algoritmos quimiométricos se presentan como herramientas útiles para la clasificación y autenticación de diversos alimentos. El presente trabajo tiene por objetivo la autenticación del origen geográfico de té comerciales de Argentina combinando para ello metodología NIR y análisis quimiométrico de modelado de clases y análisis discriminante para reconocimiento de patrones. Para lograr este objetivo, se analizaron 110 muestras de té comerciales de países sudamericanos (Argentina, Brasil y Paraguay) y asiáticos (India y China) utilizando espectroscopía NIR. Los espectros obtenidos fueron preprocesados matemáticamente para eliminar efectos indeseables tales como el desplazamiento de línea base y disminución del ruido instrumental para permitir la posterior aplicación de métodos de regresión. Se seleccionaron por validación cruzada los métodos combinados de normalización vectorial (SNV) y 1º derivada de Savitzky-Golay. Con los espectros preprocesados se procedió a elaborar un modelo de autenticación de origen geográfico de los té comerciales de Argentina en dos pasos, utilizando técnicas de modelado de clase y análisis discriminante sucesivamente. Para la primera etapa se seleccionó el método Data Driven - Soft Independent Modeling of Class Analogy (DD- SIMCA) lográndose resultados con una sensibilidad del 96,55%, especificidad del 100% y eficiencia del 97,50%, utilizando a las muestras producidas en Argentina y países limítrofes respecto de las producidas en otras regiones tales como India y China en el grupo de entrenamiento. En el segundo paso, se utilizó el método de máquinas de vectores soporte (SVM) junto con el método de selección de variables: de Filtro Basado en Correlación Rápida (FCBF) para construir un modelo que logre discriminar muestras de té argentino respecto de muestras de té provenientes de países limítrofes (Brasil y Paraguay). Luego de la optimización de hiperparámetros se logró una exactitud global del 98,30% con nueve variables seleccionadas. Finalmente, se concluye que es posible lograr la autenticación del origen geográfico de muestras de té muy similares mediante la medición de los espectros NIR combinados a herramientas quimiométricas de modelado y discriminación en dos pasos.