

1044. APLICACIÓN DE LA ESPECTROSCOPIA DE INFRARROJO CERCANO (NIR) EN EL ENTRENAMIENTO DE MODELOS PREDICTIVOS PARA LA DETERMINACIÓN DE PARÁMETROS FÍSICOQUÍMICOS EN CERVEZA

Bianchi, María Agostina^{1,2}; Ceruso, Juan Pablo¹; Gómez Pamies, Laura Cecilia¹; Benítez, Elisa Inés^{1,2}

*1 QuiTEx – UTN Facultad Regional Resistencia, 3500 Resistencia, Argentina
2 IQUIBA-NEA, UNNE, CONICET, 3400 Corrientes, Argentina*

E-mail: magostinabianchi@gmail.com

RESUMEN

El análisis de espectroscopia de infrarrojo cercano (NIR) se ha convertido en una técnica no destructiva ampliamente utilizada para analizar componentes en una muestra de alimentos en forma rápida y precisa. Asimismo, es amigable con el ambiente, ya que permite eliminar el uso de solventes, como ocurre en el caso del análisis fisicoquímico de cervezas que se presenta. En este trabajo, se investiga la aplicación de la FT-NIR en análisis ya conocidos como lo son pH, densidad final, grado alcohólico, acidez, concentración de α -ácidos y concentración de iso- α ácidos (IBU). El objetivo del estudio radica en el entrenamiento de modelos que permitan predecir las diferentes variables de interés en cerveza, simplificando el tiempo de procesamiento necesario para analizar cada variable por separado con su respectiva técnica analítica. Se utilizaron 400 datos etiquetados, correspondientes a muestras de cerveza, en las cuales se determinaron analíticamente los valores de los parámetros mencionados y se analizaron con el equipo de FT-NIR Spectrum Two (Perkin-Elmer). El procesamiento de las muestras para la obtención de los espectros se realizó utilizando cubetas de cuarzo para líquidos de 1, 0,5 y 0,1 cm de paso óptico. Además, se utilizó el accesorio NIRA (0,1 cm de paso óptico): se colocaron 3 mL de cerveza en placas de Petri (40 mm) con un adaptador de transfectancia de aluminio por encima, como superficie reflectante inerte. Se evaluaron los modelos obtenidos con cada variante de accesorio utilizada con el objetivo de definir cuál de ellos resulta más adecuado para el modelado de los parámetros fisicoquímicos de manera individual. Se utilizó el software Spectrum Quant para el entrenamiento con los datos preprocesados, mediante el algoritmo PLS. Se ajustó el número de variables latentes (vl) hasta la obtención de modelos con R^2 superiores a 0,85. Los resultados evidenciaron que el uso de NIRA proporciona modelos con mayor ajuste para todos los parámetros ($R^2=0,97$ para 70 vl). El empleo de cubetas de 0,5 y 0,1 cm también permite alcanzar valores de R^2 adecuados, pero requieren un mayor número de vl para alcanzar los resultados de NIRA (R^2 de 0,854 y 0,853 respectivamente, para 70 vl). El uso de la cubeta de 1 cm solo produjo buenos resultados para el modelado de densidad final, acidez y grado alcohólico ($R^2 = 0,85$ para 100 vl). Estas observaciones se atribuyen a que

NIRA permite obtener espectros con una significativa reducción del ruido, mientras que el uso de cubetas se ve afectado por este fenómeno en todos los casos, con mayor presencia del ruido a mayor longitud del paso óptico. Se concluye en que el accesorio NIRA es el más adecuado para utilizarse en el entrenamiento de modelos para todas las variables evaluadas. Si bien pudieron obtenerse buenos resultados con otros accesorios, el empleo de NIRA permite trabajar con un número menor de vl, disminuyendo el riesgo de sobreajuste del modelo. Este estudio representa un primer paso para la obtención de modelos predictivos y debe continuar con la etapa de validación para evaluar el rendimiento y la capacidad de realizar predicciones en nuevos datos.

Palabras clave: cerveza, espectroscopía de infrarrojo cercano, entrenamiento de modelos