

Application Note AN-NIR-110

Control de calidad del jugo de caña de azúcar.

Determinación multiparamétrica en un minuto mediante NIRS

Cana de azúcar (*Saccharum* spp.) es un cultivo muy importante para la economía global. A menudo se usa como materia prima para la producción de azúcar, alcohol, levadura y más. Brix (°Brix), Pol (%), pureza del jugo (%), azúcares reductores (%) y azúcares recuperables totales (Kg t^{-1}) son algunos de los muchos parámetros de control de calidad (QC) que deben analizarse en el jugo de cana de azúcar.

Numerosos métodos basados en varias técnicas analíticas están disponibles para el control de calidad del jugo de cana de azúcar. Estos métodos pueden llevar bastante tiempo, ya que el tratamiento de la muestra es un requisito previo. Una alternativa más rápida a estos otros métodos es la espectroscopia de infrarrojo cercano (NIRS). NIRS permite la determinación simultánea de varios componentes de control de calidad, sin productos químicos ni preparación de muestras, en menos de un minuto.

EXPERIENCIA

NIRS analizó el jugo de cana de azúcar y se recopilaron un total de 100 espectros para crear un modelo de predicción para la cuantificación de varios parámetros de control de calidad. Todas las muestras se midieron con un analizador de líquidos Metrohm NIRS DS2500 (400–2500 nm) en modo de transmisión con una celda de flujo de soporte DS2500 (Figura 1). En este estudio se utilizó una celda de flujo con un paso óptico de 1 mm. Esta celda de flujo se llenó mediante una bomba peristáltica. El paquete de software Vision Air Complete de Metrohm se utilizó para toda la adquisición de datos y el desarrollo del modelo de predicción.

Tabla 1. Resumen de equipos de hardware y software.

Equipo	Número de artículo
Analizador de líquidos DS2500	2.929.0010
Celda de flujo del soporte DS2500	6.7493.000
Cubeta de cuarzo NIRS caudal 1 mm	6.7401.310
Vision Air 2.0 completo	6.6072.208





Figura 1. Metrohm NIRS DS2500 Liquid Analyzer y DS2500 Holder Flow Cell utilizados para la determinación rápida de varios parámetros de control de calidad en jugo de caña de azúcar.

RESULTADOS

Los espectros Vis-NIR obtenidos (Figura 2) se utilizaron para crear un modelo de predicción para la cuantificación de Brix (°Brix), Pol (%), pureza del jugo (%), azúcares reductores (%) y azúcares recuperables totales (Kg t^{-1}). La calidad del modelo de predicción se evaluó mediante diagramas de correlación que muestran una correlación muy alta entre la predicción Vis-NIR y los valores de referencia. Las respectivas cifras de mérito (FOM) muestran la precisión esperada de una predicción durante el análisis de rutina (Figuras 3–8).

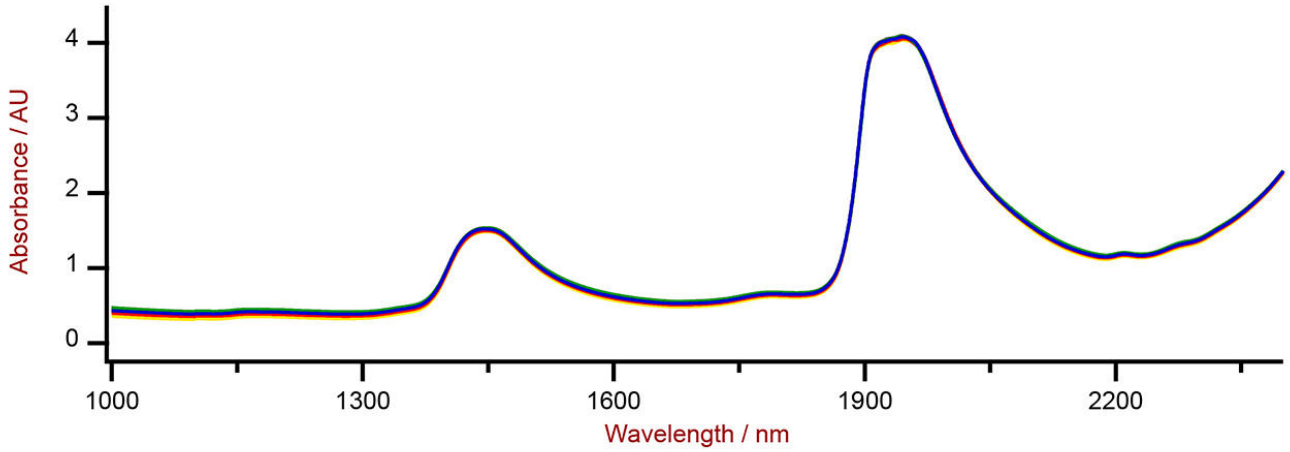


Figura 2. Selección de espectros Vis-NIR de muestras de jugo de caña de azúcar analizadas en un analizador de líquidos DS2500 con una celda de flujo de 1 mm de paso óptico.

RESULTADO BRIX

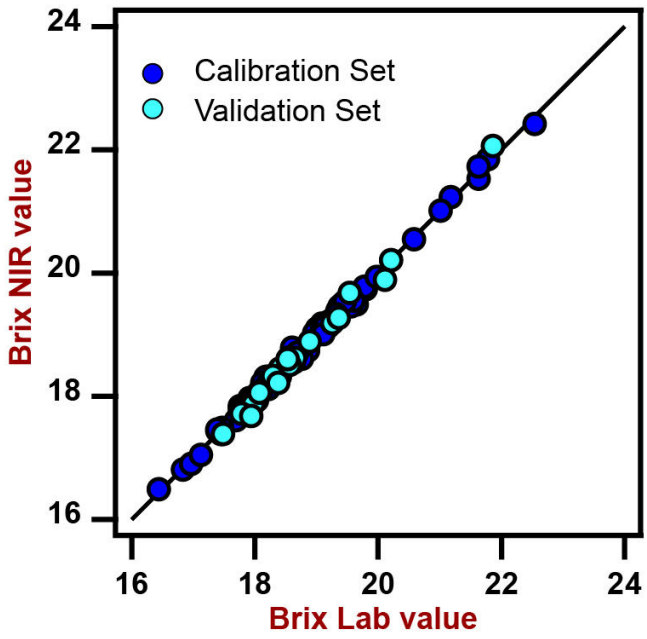


Figura 3. Diagrama de correlación y los respectivos FOM para la predicción de Brix en jugo de caña de azúcar utilizando un Analizador de Líquidos DS2500. Los valores de laboratorio se evaluaron utilizando un refractómetro.

Figuras de merito	Valor
R^2	0,9875

Error estándar de calibración	0,1323 (° Brix)
Error estándar de validación cruzada	0,1467 (° Brix)
Error estándar de validación	0,138 (° Brix)

RESULTADO POL

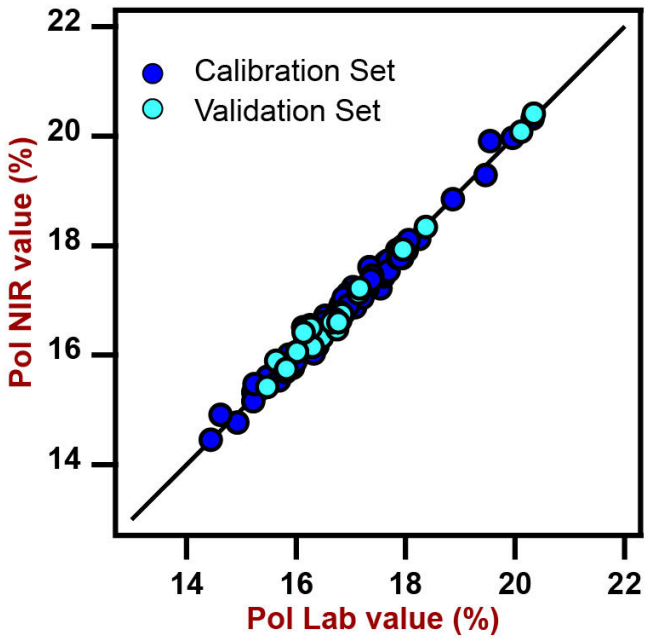


Figura 4. Diagrama de correlación y los respectivos FOM para la predicción de Pol en jugo de caña de azúcar utilizando un Analizador de Líquidos DS2500. Los valores de laboratorio se calcularon a partir de la lectura de sacarosa, Brix y algunas constantes.

Figuras de merito	Valor
R^2	0,9833
Error estándar de calibración	0,1506%
Error estándar de validación cruzada	0,1851%
Error estándar de validación	0,1388%

RESULTADO PURITY

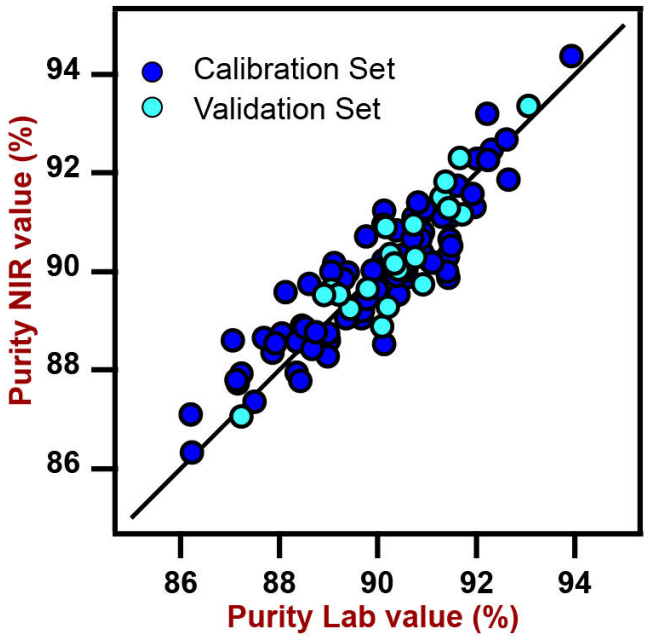


Figura 5. Diagrama de correlación y los respectivos FOM para la predicción de la pureza del jugo de caña de azúcar utilizando un analizador de líquidos DS2500. Los valores de laboratorio se calcularon utilizando los resultados de las determinaciones de Pol y Brix: Pureza = 100 × (Pol/Brix).

Figuras de merito	Valor
R^2	0,8194
Error estándar de calibración	0,7202%
Error estándar de validación cruzada	0,7596%
Error estándar de validación	0,564%

RESULTADO REDUCING SUGARS

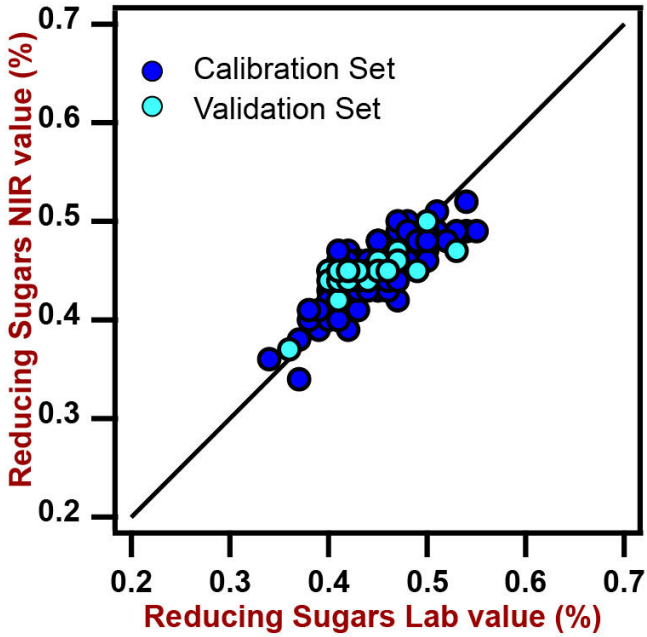


Figure 6. Diagrama de correlación y los respectivos FOM para la predicción de azúcares reductores en jugo de caña de azúcar utilizando un Analizador de Líquidos DS2500. Los valores de laboratorio se midieron con cromatografía iónica (IC).

Figuras de merito	Valor
R^2	0,6497
Error estándar de calibración	0,0263%
Error estándar de validación cruzada	0,0291%
Error estándar de validación	0,0249%

RESULT SUCROSE

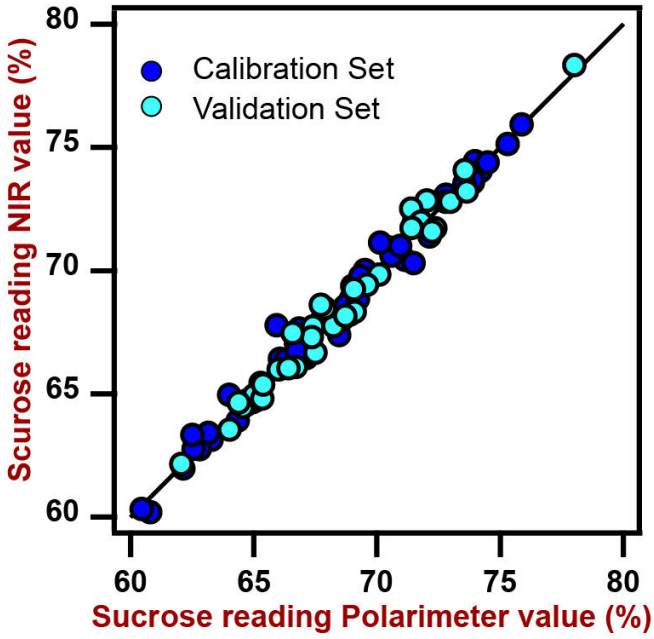


Figura 7. Diagrama de correlación y los respectivos FOM para la predicción de la lectura de sacarosa en jugo de caña de azúcar utilizando un analizador de líquidos DS2500. Los valores de laboratorio se evaluaron con un polarímetro.

Figuras de merito	Valor
R^2	0,9911
Error estándar de calibración	0,5388%
Error estándar de validación cruzada	0,6604%
Error estándar de validación	0,497%

RESULTADO TOTAL RECOVERABLE SUGARS

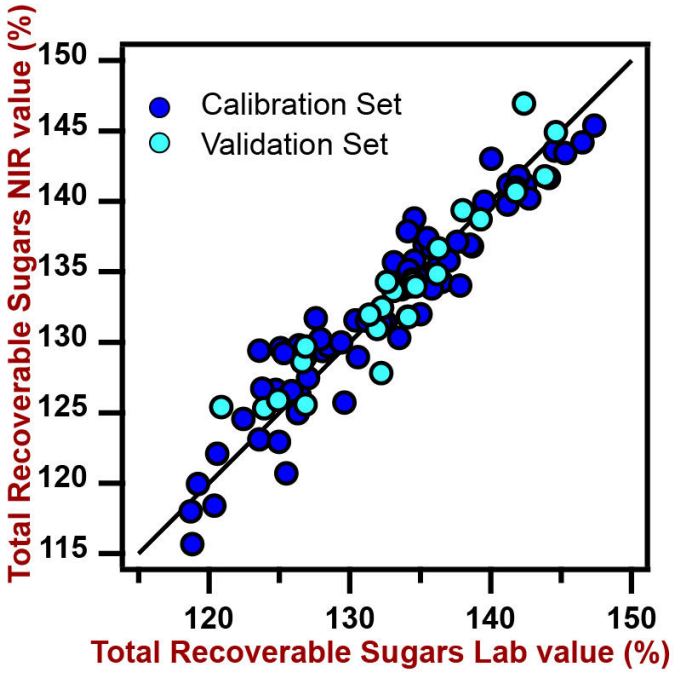


Figura 8. Diagrama de correlación y los respectivos FOM para la predicción de azúcares totales recuperables en jugo de caña de azúcar utilizando un Analizador de Líquidos DS2500. Los valores de laboratorio se evaluaron utilizando valores de Pol y azúcares reductores: TRS = (9.5263 × Pol) – (9.05 × RS).

Figuras de merito	Valor
R^2	0,9463
Error estándar de calibración	2,2985%
Error estándar de validación cruzada	2,5118%
Error estándar de validación	1,9074%

CONCLUSIÓN

Esta nota de aplicación demuestra la viabilidad de determinar Brix, Pol, pureza del jugo, azúcares reductores y azúcares recuperables totales en el jugo de cana de azúcar con espectroscopia NIR. La espectroscopia Vis-NIR permite una alternativa rápida y muy precisa a otros métodos estándar (Tabla 2). No se requiere preparación de muestras y los resultados se entregan en menos de un minuto.

Tabla 2. Descripción general del tiempo de resultado para los diferentes parámetros de control de calidad medidos típicamente en el jugo de cana de azúcar.

Parámetro	Método	tiempo de resultado
Brix	Refractómetro	1 minuto
Pol	Calculado a partir de Pol y Brix, así como la aplicación de algunas constantes	10 min preparación de la muestra (clarificación y filtración) + 1 min polarímetro + 1 min refractómetro
Pureza	Calculado a partir de Pol y Brix	Pureza = 100 × (Pol/Brix)
Azúcares reductores (RS)	Cromatografía iónica	10 min preparación de muestra (clarificación y filtración) + 40 min IC
Lectura de sacarosa	Polarímetro	10 min preparación de la muestra (clarificación y filtración) + 1 min polarímetro
Azúcares recuperables totales (TRS)	Calculado a partir de Pol y azúcares reductores	TRS = (9.5263 × Pol) – (9.05 × RS)

Internal reference: AW NIR CH-0073-042023

CONTACT

Metrohm Argentina S.A.
Avda. Regimiento de
Patricios 1456
1266 Buenos Aires
info@metrohm.com.ar

CONFIGURACIÓN



DS2500 Liquid Analyzer

Sólida espectroscopía del infrarrojo cercano para control de calidad en el laboratorio y en el entorno de producción.

El DS2500 Liquid Analyzer es la solución probada y flexible para los análisis rutinarios de líquidos a lo largo de toda la cadena de producción. Su diseno robusto hace que el DS2500 Liquid Analyzer sea resistente al polvo, la humedad y las vibraciones, lo que hace que sea especialmente adecuado para el uso en entornos de producción adversos.

El DS2500 Liquid Analyzer cubre todo el rango espectral de 400 a 2500 nm, calienta las muestras hasta 80°C y es compatible con diferentes viales desechables y cubetas de cuarzo. El DS2500 Liquid Analyzer puede, por tanto, adaptarse a sus necesidades individuales de muestras y le ayuda a obtener resultados precisos y reproducibles en menos de un minuto. El reconocimiento integrado del portamuestras y el software intuitivo Vision Air garantizan además un funcionamiento fácil y seguro para el usuario.

En el caso de cantidades de muestra más grandes, la productividad se puede aumentar considerablemente utilizando una celda de flujo continuo en combinación con un robot de muestras Metrohm.