



Application Note AN-NIR-145

Análisis de agua de coco mediante NIRS

Determinación de grados Brix, salinidad, conductividad y pH con un solo instrumento.

El agua de coco fresca es la principal parte comestible del coco (además de la pulpa) y ha ganado popularidad como bebida saludable en los últimos años. La calidad se ve influenciada por múltiples factores, como el momento de la cosecha, el lugar de cultivo y la duración del almacenamiento. Esto supone un reto para los productores industriales a la hora de lograr y mantener la calidad de producto deseada. Analizar las propiedades del agua de coco con métodos de laboratorio estándar puede resultar

complicado, ya que se necesita personal de laboratorio capacitado. En cambio, la espectroscopia de infrarrojo cercano (NIRS) es rápida, no utiliza productos químicos y no requiere preparación de la muestra. Esta nota de aplicación explica cómo se utiliza la espectroscopia de infrarrojo cercano (NIRS) para el análisis multiparamétrico del agua de coco. La solución NIRS es fácil de usar y se puede implementar tanto en línea como en un laboratorio de control de calidad.

EQUIPO EXPERIMENTAL

Un analizador OMNIS NIR de líquidos con una celda de flujo continuo de 1 mm (**Figura 1**) se utilizó para analizar 206 muestras de coco de un proveedor comercial. En esta configuración, una bomba peristáltica inyecta la muestra en la celda de flujo continuo, que está insertada en el portacubetas. La celda se enjuaga con agua después de cada medición.



Figure 1. El analizador de líquidos OMNIS NIR de Metrohm incorpora una celda de flujo continuo y un soporte.

RESULTADO

Los espectros NIR obtenidos (**Figura 2**) se utilizaron para crear modelos de predicción para los diferentes parámetros de referencia (es decir, Brix, salinidad, conductividad y pH). Se utilizó un conjunto de validación independiente del 25 % para validar los modelos de calibración. Los diagramas de correlación que muestran la relación entre la predicción NIR y los valores de referencia se muestran en **Figuras 3–7**

junto con las respectivas cifras de mérito (FOM). Los errores estándar de validación cruzada (SECV) y los errores estándar de predicción (SEP) mostrados indican la precisión esperada durante el análisis rutinario en los laboratorios de control de calidad. Los datos FOM del valor de pH indican que el modelo puede utilizarse para la clasificación o el seguimiento de tendencias debido a la limitada correlación NIRS.

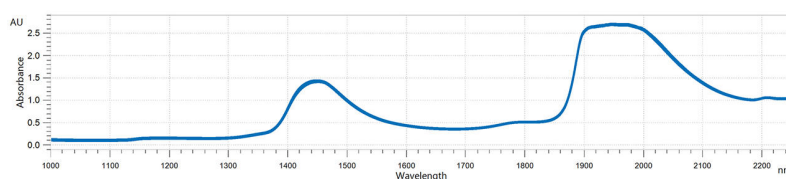


Figure 2. Selección de espectros NIR de muestras de agua de coco medidas con una celda de flujo continuo de 1 mm en un analizador NIR OMNIS Liquid.

VALOR BRIX RESULTANTE

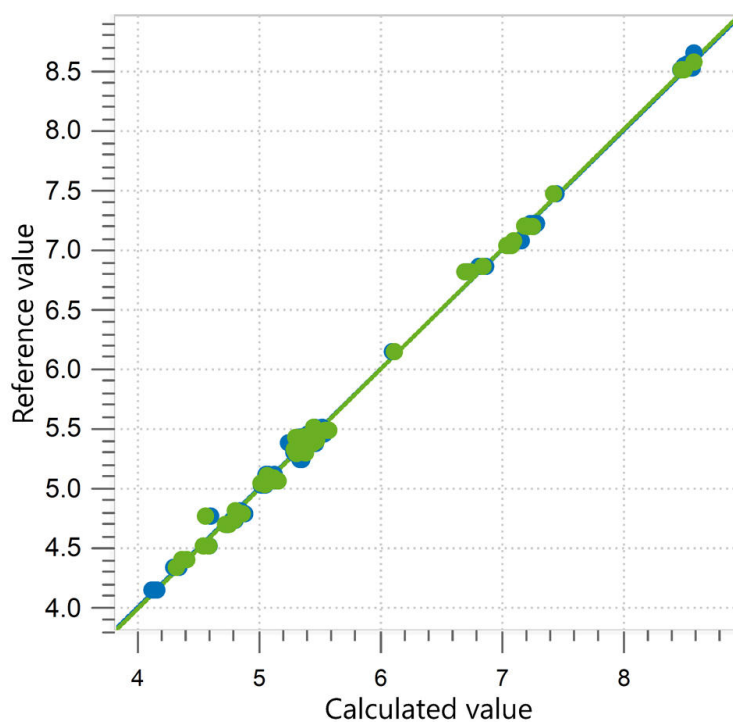


Figure 3. Diagrama de correlación y los respectivos FOM para la predicción de Brix en agua de coco utilizando un analizador de líquidos OMNIS NIR. El conjunto de datos de calibración se muestra en azul, y el conjunto de datos de validación externa, en verde.

R ²	SEC (°Bx)	SECV (°Bx)	SEP (°Bx)
0,997	0,04	0,04	0,05

SALINIDAD RESULTANTE

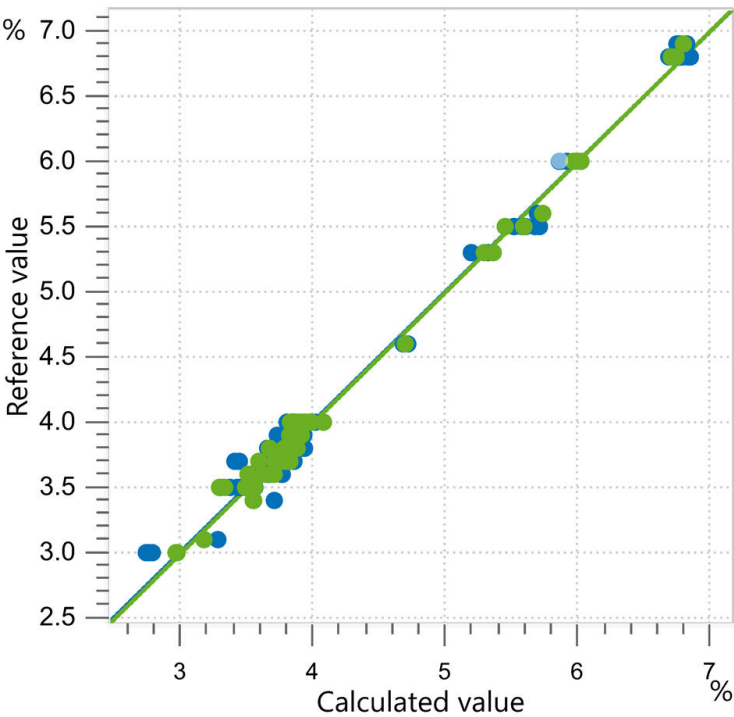


Figure 4. Diagrama de correlación y los respectivos FOM para la predicción de la salinidad del agua de coco utilizando un analizador OMNIS NIR Liquid. El conjunto de datos de calibración se muestra en azul, y el conjunto de datos de validación externa, en verde.

R ²	SEC (%)	SECV (%)	SEP (%)
0,992	0,08	0,10	0,09

VALOR DE PH RESULTANTE

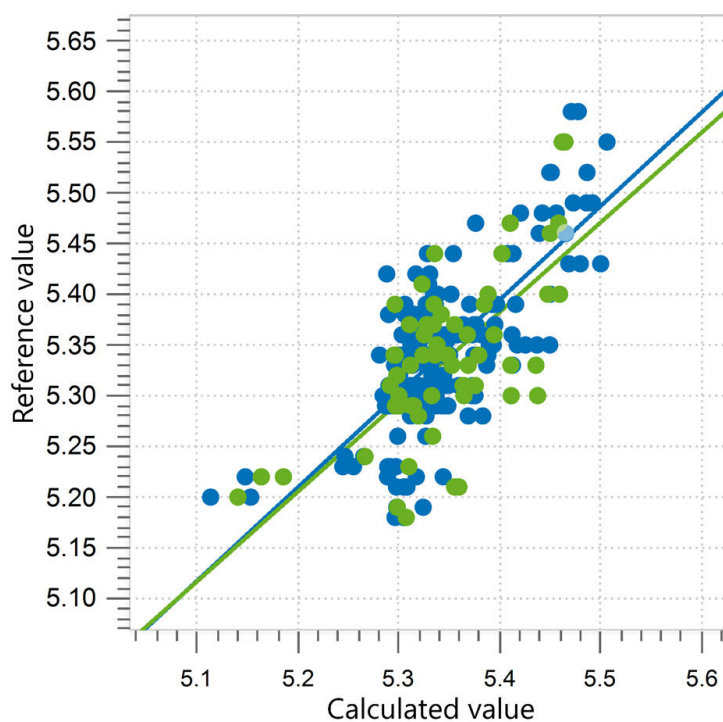


Figure 5. Diagrama de correlación y los respectivos FOM para la predicción del valor de pH del agua de coco utilizando un analizador de líquidos OMNIS NIR. El conjunto de datos de calibración se muestra en azul, y el conjunto de datos de validación externa, en verde.

R^2	SEGUNDO	SECV	SEP
0,658	0,05	0,05	0,06

CONDUCTIVIDAD RESULTANTE

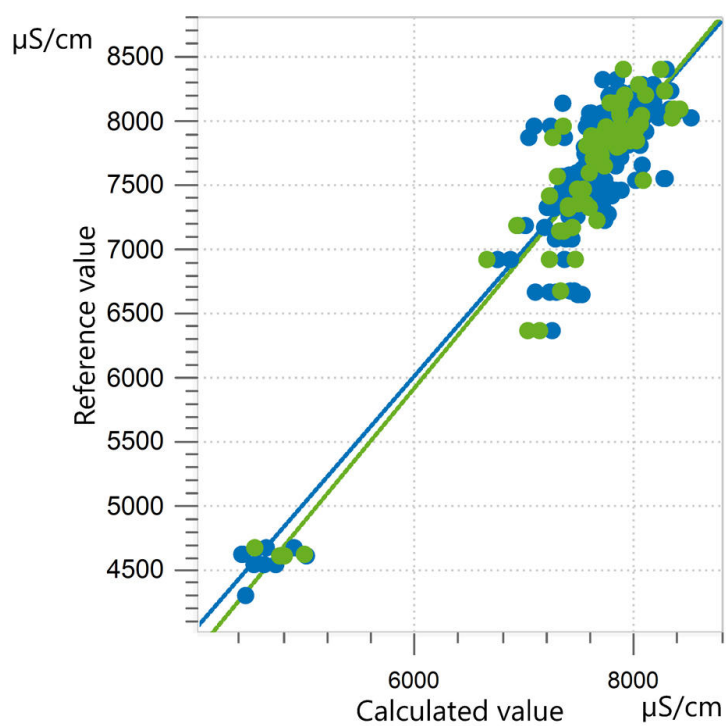


Figure 6. Diagrama de correlación y los respectivos FOM para la predicción de la conductividad del agua de coco utilizando un analizador de líquidos OMNIS NIR. El conjunto de datos de calibración se muestra en azul, y el conjunto de datos de validación externa, en verde.

R^2	SEC ($\mu\text{S/cm}$)	SECV ($\mu\text{S/cm}$)	SEP ($\mu\text{S/cm}$)
0,892	250	286	285

TURBIDEZ RESULTANTE

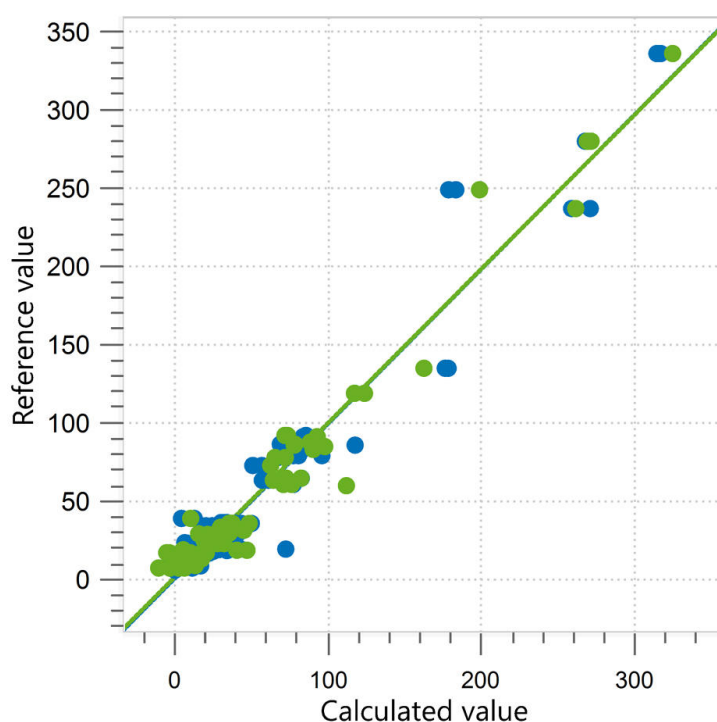


Figure 7. Diagrama de correlación y los respectivos FOM para la predicción de la turbidez del agua de coco utilizando un analizador de líquidos OMNIS NIR. El conjunto de datos de calibración se muestra en azul, y el conjunto de datos de validación externa, en verde.

R ²	SEC (ppm)	SECV (ppm)	SEP (ppm)
0,956	10,05	13,04	14,90

CONCLUSIÓN

Esta nota de aplicación demuestra la viabilidad del uso de la espectroscopia NIR para el control de calidad del agua de coco. Mediante NIRS se pueden monitorizar parámetros como los grados Brix, la conductividad, la turbidez, el pH y la salinidad en cuestión de segundos, sin necesidad de preparar la muestra. La configuración presentada, con una celda

de flujo continuo, no solo simplifica la manipulación de las muestras, sino que también permite la automatización completa al utilizar un robot de muestras OMNIS.

Además del agua de coco, el propio fruto del coco también puede analizarse mediante espectroscopia de infrarrojo cercano.

CONTACT

Metrohm Hispania
Calle Aguacate 15
28044 Madrid

mh@metrohm.es

CONFIGURACIÓN



OMNIS NIR Analyzer Liquid

Espectrómetro del infrarrojo cercano para el análisis de muestras líquidas.

Desarrollado y producido de conformidad con las normas de calidad suizas, el OMNIS NIR Analyzer es la solución de espectroscopía del infrarrojo cercano (NIRS) para efectuar análisis de rutina en toda la cadena de producción. La aplicación de las tecnologías más avanzadas y la integración en el moderno OMNIS Software se reflejan en la velocidad, la manejabilidad y el uso flexible de este espectrómetro NIR.

Visión conjunta de las ventajas del OMNIS NIR Analyzer Liquid:

- Medidas de muestras líquidas en menos de 10 segundos
- Regulación de temperatura de la muestra en el rango de 25–80 °C
- Detección automática de la inserción y la retirada del recipiente de muestras
- Sencilla integración en un sistema de automatización o vinculación con tecnologías de análisis adicionales (titulación)
- Permite usar numerosos recipientes de muestras con distintas longitudes de recorrido



Soporte OMNIS NIR, celdas de flujo continuo

Soportes de cubetas para el OMNIS NIR Analyzer para celdas de flujo continuo

(6.7401.300; 6.7401.310; 6.7401.320; 6.7401.330; 6.7401.340).



Celda de flujo continuo, 1 mm

Cubetas de cuarzo con abertura y una longitud de recorrido óptico de 1,0 mm, adecuadas para análisis de espectroscopía del infrarrojo cercano (NIRS).

Compatibles con:

- Soporte OMNIS NIR, celda de flujo continuo (6.07401.100)
- Soporte DS2500 para celdas de flujo (6.7493.000)

OMNIS
A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

Licencia "Stand-Alone" de OMNIS

Habilita el modo "Stand-Alone" del software OMNIS en un ordenador con Windows™.

Características:

- Se incluye una licencia de los aparatos OMNIS.
- Debe activarse en el portal de licencias de Metrohm.

OMNIS
A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

Licencia de software de Quant Development

Licencia de software para la creación y edición de modelos de cuantificación en una instalación de OMNIS Software "Stand-Alone".