



Application Note AN-NIR-145

Análise de água de coco por NIRS

Determinação de Brix, salinidade, condutividade e pH com um único instrumento

A água de coco fresca é a principal parte comestível do coco (além da polpa) e vem ganhando popularidade como bebida saudável nos últimos anos. Diversos fatores influenciam a qualidade, como o momento da colheita, o local de cultivo e o tempo de armazenamento. Isso representa um desafio para os produtores industriais alcançarem e manterem a qualidade desejada do produto.

Testar as propriedades da água de coco com métodos laboratoriais padrão pode ser desafiador, já que é

necessário pessoal de laboratório treinado. Em contrapartida, a espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS) é rápida, não utiliza produtos químicos e não exige preparo de amostra. Esta Nota de Aplicação explica como o NIRS é utilizado na análise multiparamétrica da água de coco. A solução NIRS é fácil de usar e pode ser implementada tanto atline quanto em um laboratório de controle de qualidade.

EQUIPAMENTO EXPERIMENTAL

Um OMNIS NIR Analyzer Liquid com uma cela de fluxo de 1 mm (**Figura 1**) foi utilizado para analisar 206 amostras de coco de um fornecedor comercial. Nessa configuração, uma bomba peristáltica injeta a amostra na cela de fluxo, que é inserida no suporte de cubeta. A cela é enxaguada com água após cada medição.



Figura 1. O OMNIS NIR Analyzer Liquid da Metrohm, equipado com uma cela de fluxo e suporte.

RESULTADO

Os espectros NIR obtidos (**Figura 2**) foram utilizados para criar modelos de previsão para os diferentes parâmetros de referência (ou seja, Brix, salinidade, condutividade e pH). Um conjunto de validação independente de 25% foi utilizado para validar os modelos de calibração. Os diagramas de correlação, que mostram a relação entre a previsão NIR e os valores de referência, são exibidos nas **Figuras 3–7**,

junto com as respectivas figuras de mérito (FOM). Os erros padrão de validação cruzada (SECV) e os erros padrão de previsão (SEP) exibidos mostram a precisão esperada durante a análise de rotina em laboratórios de CQ. Os dados de FOM do valor de pH indicam que o modelo pode ser usado para classificação ou monitoramento de tendência, devido à correlação limitada do NIRS.

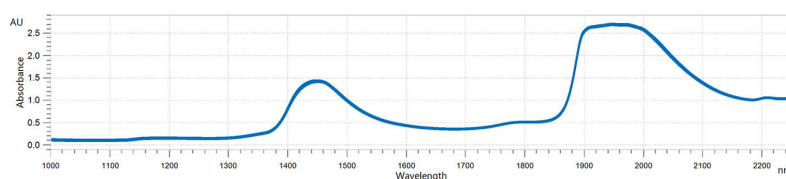


Figura 2. Seleção de espectros NIR de amostras de água de coco medidas com uma cela de fluxo de 1 mm em um OMNIS NIR Analyzer Liquid.

RESULTADO DO VALOR DE BRIX

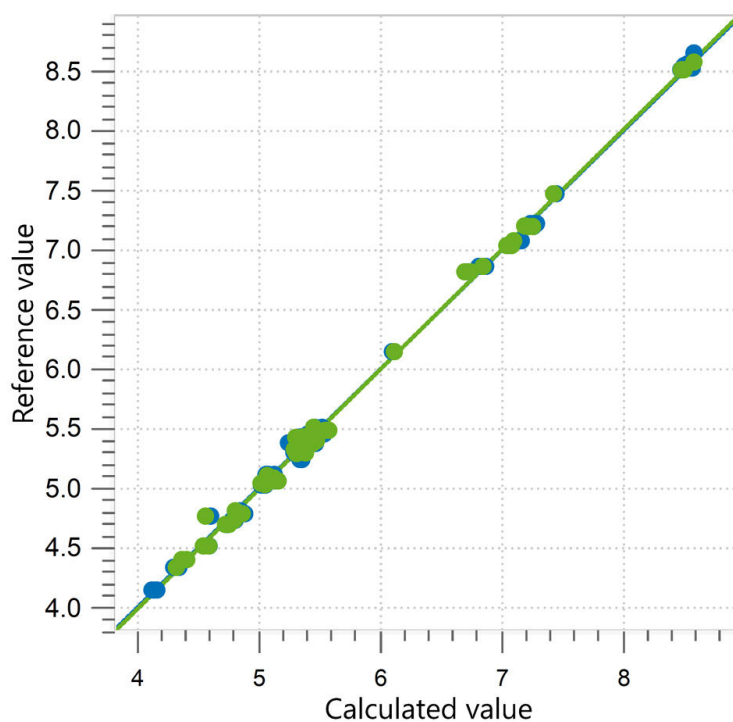


Figura 3. Diagrama de correlação e as respectivas FOMs para a previsão de Brix na água de coco usando um OMNIS NIR Analyzer Liquid. O conjunto de dados de calibração é mostrado em azul, e o conjunto de dados de validação externa em verde.

R^2	SEC (°Bx)	SECV (°Bx)	SEP (°Bx)
0.997	0.04	0.04	0.05

RESULTADO DE SALINIDADE

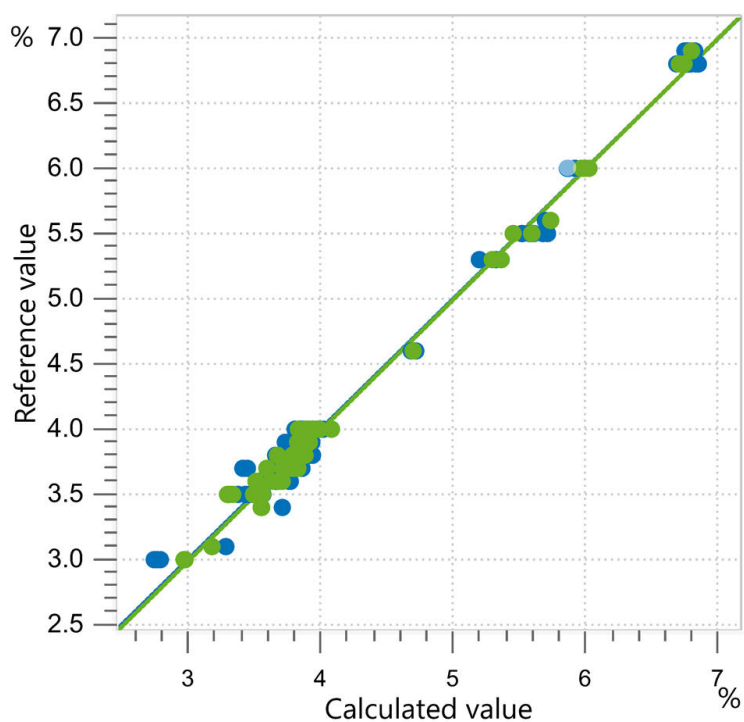


Figura 4. Diagrama de correlação e as respectivas FOMs para a previsão da salinidade da água de coco usando um OMNIS NIR Analyzer Liquid. O conjunto de dados de calibração é mostrado em azul, e o conjunto de dados de validação externa em verde.

R^2	SEC (%)	SECV (%)	SEP (%)
0.992	0.08	0.10	0.09

RESULTADO DO VALOR DE PH

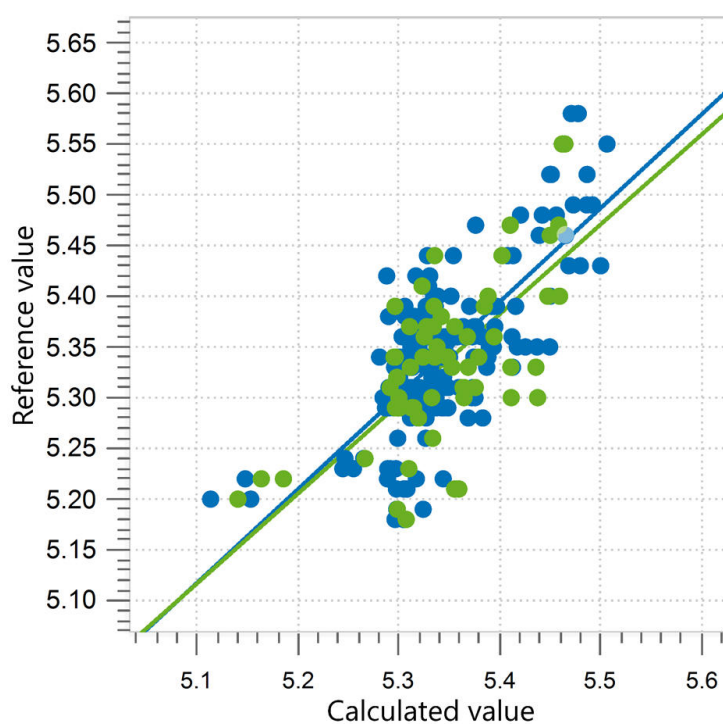


Figura 5. Diagrama de correlação e as respectivas FOMs para a previsão do valor de pH da água de coco usando um OMNIS NIR Analyzer Liquid. O conjunto de dados de calibração é mostrado em azul, e o conjunto de dados de validação externa em verde.

R^2	SEC	SECV	SEP
0.658	0.05	0.05	0.06

RESULTADO DE CONDUTIVIDADE

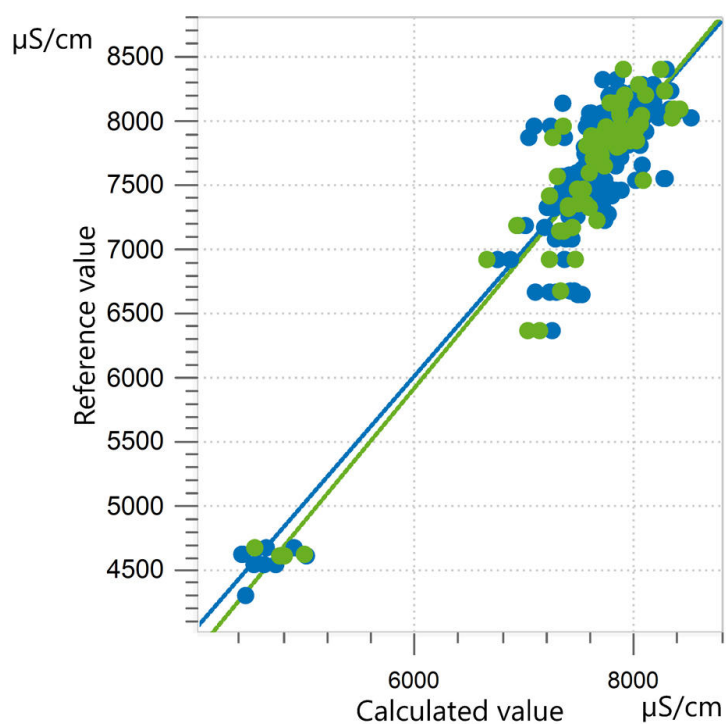


Figura 6. Diagrama de correlação e as respectivas FOMs para a previsão da condutividade da água de coco usando um OMNIS NIR Analyzer Liquid. O conjunto de dados de calibração é mostrado em azul, e o conjunto de dados de validação externa em verde.

R^2	SEC ($\mu\text{S/cm}$)	SECV ($\mu\text{S/cm}$)	SEP ($\mu\text{S/cm}$)
0.892	250	286	285

RESULTADO DE TURBIDEZ

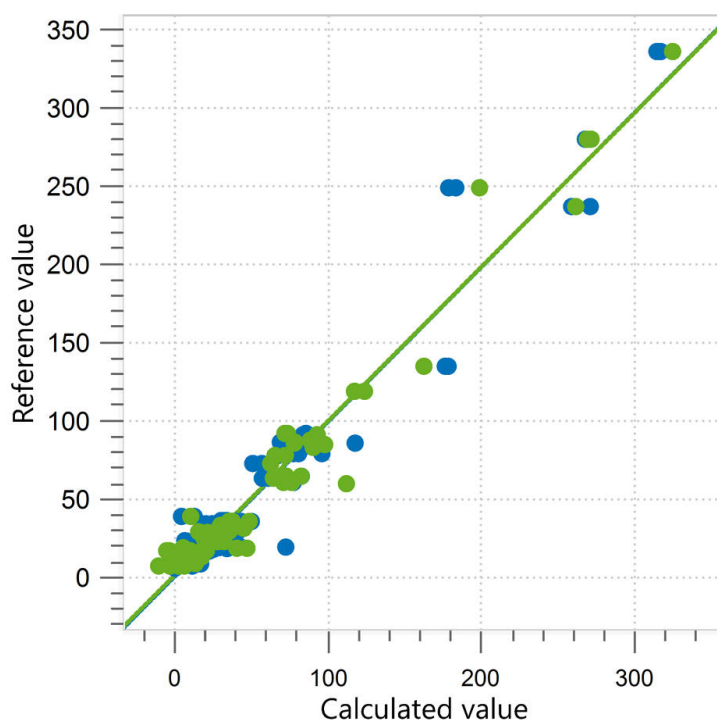


Figura 7. Diagrama de correlação e as respectivas FOMs para a previsão da turbidez da água de coco usando um OMNIS NIR Analyzer Liquid. O conjunto de dados de calibração é mostrado em azul, e o conjunto de dados de validação externa em verde.

R ²	SEC (ppm)	SECV (ppm)	SEP (ppm)
0.956	10.05	13.04	14.90

CONCLUSÃO

Esta Nota de Aplicação demonstra a viabilidade do uso da espectroscopia NIR para o controle de qualidade da água de coco. Os parâmetros Brix, condutividade, turbidez, valor de pH e salinidade podem ser monitorados por NIRS em segundos, sem qualquer preparo de amostra. A configuração apresentada, com cela de fluxo, não só simplifica o

manuseio das amostras, como também permite automação completa ao utilizar um OMNIS Sample Robot.

Além da água de coco, o próprio fruto do coco também pode ser analisado usando espectroscopia no infravermelho próximo.

CONTACT

Metrohm Brasil
Rua Minerva, 161
05007-030 São Paulo

metrohm@metrohm.com.br

CONFIGURAÇÃO



OMNIS NIR Analyzer Liquid

Near-infrared spectrometer for liquid samples.

Developed and produced in accordance with Swiss quality standards, the OMNIS NIR Analyzer is the near-infrared spectroscopy (NIRS) solution for routine analysis along the entire production chain. Its application of the latest technologies and its integration in the modern OMNIS Software are reflected in its speed, operability, and flexible utilization of this NIR spectrometer.

Overview of the advantages of the OMNIS NIR Analyzer Liquid:

- Measurements of liquid samples in less than 10 seconds
- Temperature control on the sample from 25–80 °C
- Automatic detection of the insertion and removal of the sample vessel
- Simple integration in an automation system or link with additional analysis technologies (titration)
- Supports numerous sample vessels with different path lengths

Holder OMNIS NIR, flow-through cells

Cuvette holder for the OMNIS NIR Analyzer for flow-through cells

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





Flow-through cell, 1 mm

Flow quartz cuvettes with an optical path length of 1.0 mm suitable for near-infrared spectroscopy (NIRS) analyses.

Compatible with:

- Holder OMNIS NIR, flow-through cell (6.07401.100)
- DS2500 holder for flow cells (6.7493.000)

OMNIS
A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

OMNIS Stand-Alone license

Enables stand-alone operation of the OMNIS software on a WindowsTM computer.

Features:

- The license already includes one OMNIS instrument license.
- Must be activated via the Metrohm licensing portal.

OMNIS
A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

Software license Quant Development

Software license for the creation and editing of quantification models in a stand-alone OMNIS Software installation.