



9^o Congreso
Argentino de
**QUÍMICA
ANALÍTICA**

Héctor Fernández y María Alicia Zon

Compiladores

Actas de resúmenes

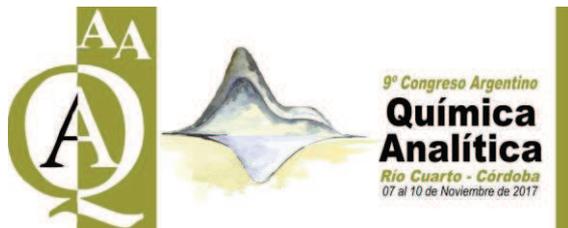
7 al 10 de Noviembre de 2017

Río Cuarto, Córdoba, Argentina

ISBN 978-987-688-238-5

e-book

UniRío
editora



PQ33

ME TOMO CINCO MINUTOS... ME TOMO UNA HSI!

Hidalgo, M.¹, Dantas, W.², Pellerano, R. G.¹, Poppi, R.²

1. IQUIBA-NEA (UNNE-CONICET). Av. Libertad 5470 – Corrientes. ARGENTINA. 2. Instituto de Química UNICAMP. Caixa Postal 6154 Campinas SP. BRASIL. E-mail: roberto.pellerano@comunidad.unne.edu.ar

Introducción

HSI es la sigla inglesa de imagen hiperespectral. En este resumen se presentan los resultados parciales obtenidos como parte del plan de trabajos de una beca externa de Conicet realizada en el Instituto de Química (UNICAMP). El objeto de este trabajo ha sido desarrollar y estudiar los alcances de una metodología alternativa, basada en la espectrometría molecular en la región del infrarrojo cercano (NIR) combinada con métodos quimiométricos, para la clasificación de muestras de té (*Camelliasinensis*) de acuerdo a su origen geográfico. Para ello, se tomaron imágenes hiperespectrales en la zona del NIR de muestras comerciales de té negro y té verde provenientes de distintos países del Mercosur (Argentina, Paraguay y Brasil).

Una HSI es una imagen digital que contiene un espectro molecular por cada pixel, permitiendo revelar y visualizar la distribución espacial de numerosos compuestos químicos. Como consecuencia de esta arquitectura, cada HSI contiene una gran cantidad de datos dispuestos en forma de tres dimensiones, dos de ellas referidas a la distribución de pixeles y la tercera con los valores correspondientes a cada espectro, lo que hace necesario emplear técnicas de análisis multivariante de imágenes para obtener información relevante de las mismas.

Resultados y Conclusiones

En este trabajo se presentan los resultados obtenidos para 15 marcas comerciales de té verde. Las muestras fueron comprimidas en pastillas previo a su análisis. Se tomaron HSI de tres puntos diferentes en cada pastilla utilizando un sistema de obtención de imágenes hiperespectrales (Perkin-Elmer Spotlight 400N) en la región espectral de 4000 a 7800 cm^{-1} generando una HSI (16×16×254) en cada punto. Una vez importados los archivos, los hipercubos de cada imagen se descompusieron en matrices aumentadas por columna que fueron analizadas mediante el método MCR-ALS (1-2). El método MCR-ALS permite obtener los perfiles de concentración y espectros de los componentes puros presentes en cada muestra. Cinco componentes resultaron óptimos para hacer converger el algoritmo, con una falta de ajuste inferior al 1,0%. Los resultados de los perfiles de abundancia de cada componente se utilizaron luego para la aplicación de diferentes métodos de clasificación multivariante, LDA, PLS-DA y SVM-DA. Los resultados obtenidos demostraron que el método SVM-DA fue el que tuvo mejor desempeño y fue capaz de modelar la matriz de datos con una tasa de acierto superior al 90% cuando se utilizó el método de validación cruzada por lotes (10-fold crossvalidation).

Referencias

- 1) J. Jaumot, R. Gargallo, A. de Juan, R. Tauler, Chemometr Intell Lab Sys 76(2005)101-110
- 2) J. Jaumot, A. de Juan, R. Tauler, Chemometr Intell Lab Sys 140 (2016) 1-12