

UNIVERSIDAD NACIONAL TORIBIO RODRÍGUEZ DE MENDOZA DE AMAZONAS



## ESCUELA DE POSGRADO

# MAESTRÍA EN PRODUCCIÓN ANIMAL

# TESIS "EVALUACIÓN DE RANGOS DEL ESPECTRO ELECTROMAGNÉTICO PARA PREDECIR LA CARACTERIZACIÓN FISICOQUÍMICA DE CÁSCARA DE CAFÉ PARA ALIMENTACIÓN ANIMAL"

# PARA OPTAR EL GRADO DE MAESTRO EN CIENCIAS EN PRODUCCIÓN ANIMAL

Presentado por: Bach. Wuesley Yusmein Alvarez Garcia

Asesor: Dr. Wilson Manuel Castro Silupu

Co-Asesor: Ms.C. Tony Steven Chuquizuta Trigoso

CHACHAPOYAS – PERÚ 2018

## DEDICATORIA

A mis padres, por el apoyo constante y los consejos brindados.

A mi esposa Yudith por el soporte emocional en todo el proceso de esta investigación.

A mi Hijo Angher, por ser el motivo de mi inspiración cada día.

#### AGRADECIMIENTO

A CIENCIACTIVA, CONCYTEC por el apoyo brindado para cursar mis estudios de maestría en la modalidad de becario, y por el financiamiento para realizar el presente trabajo de investigación.

A la UNTRM, en especial a la FIZAB por las facilidades para el uso de los equipos y laboratorios para realizar esta investigación.

Al Dr. Wilson Manuel Castro Silupu, por ser un guía científico muy eficiente en todo el proceso de la investigación.

Al Ms.C. Tony Steven Chuquizuta Trigoso, por el apoyo en los procedimientos necesarios para ejecutar el trabajo de investigación.

## AUTORIDADES DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL TORIBIO RODRIGUEZ DE MENDOZA DE AMAZONAS

# Dr. POLICARPIO CHAUCA VALQUI Rector

# Dr. MIGUEL ANGEL BARRENA GURBILLÓN Vicerrector Académico

# Dra. FLOR TERESA GARCÍA HUAMÁN Vicerrectora de Investigación

# Dr. OSCAR ANDRÉS GAMARRA TORRES Director de la Escuela de Posgrado

## VISTO BUENO DEL ASESOR

Yo, **Wilson Manuel Castro Silupu**, identificado con DNI N° 40322327 Doctor en ciencia, Tecnología y gestión alimentaria, profesor adjunto de la escuela de posgrado de la Universidad Nacional Toribio Rodriguez de Mendoza de Amazonas.

Doy VISTO BUENO, al informe de tesis titulado: "EVALUACIÓN DE RANGOS DEL ESPECTRO ELECTROMAGNÉTICO PARA PREDECIR LA CARACTERIZACIÓN FISICOQUÍMICA DE CÁSCARA DE CAFÉ PARA ALIMENTACIÓN ANIMAL" elaborado por el bachiller Wuesley Yusmein Alvarez Garcia, para optar el grado de Maestro en Producción Animal, que estuvo bajo mi asesoramiento.

Por lo tanto:

Para constancia de la conformidad y validez del mismo firmo el presente.

Chachapoyas, 08 de marzo del 2018

Dr. Wilson Manuel Castro Silupu (Asesor)

## DECLARACIÓN JURADA DE NO PLAGIO

Yo, Wuesley Yusmein Alvarez Garcia con DNI N° 47500039 estudiante de la Maestría en Producción Animal de la escuela de Pos Grado de la Universidad Nacional Toribio Rodríguez de Mendoza de Amazonas.

Declaro bajo juramento que:

- Soy autor de la tesis titulada: "EVALUACIÓN DE RANGOS DEL ESPECTRO ELECTROMAGNÉTICO PARA PREDECIR LA CARACTERIZACIÓN FISICOQUÍMICA DE CÁSCARA DE CAFÉ PARA ALIMENTACIÓN ANIMAL", la misma que se presentó para para optar el Grado de Maestro en Producción Animal
- La tesis no ha sido plagiada total ni parcialmente, para lo cual se ha respetado las normas internacionales de citas y referencias para las fuentes de consultas.
- La tesis presentada no atenta contra derechos de terceros.
- La tesis no ha sido publicada ni presentada anteriormente para obtener algún grado académico previo o título profesional.
- Los datos presentados en los resultados son reales, no han sido falsificados, ni duplicados, ni copiados.

De identificarse fraude, piratería, plagio, falsificación o que el trabajo de investigación haya sido publicado anteriormente, asumidos las consecuencias y sanciones que nuestras acciones deriven, sometiéndose a la normativa vigente de la Universidad Nacional Toribio Rodríguez de Mendoza de Amazonas.

Chachapoyas 15 de mayo de 2018

Bach. Wuesley Yusmein Alvarez Garcia DNI 47500039

## JURADO EVALUADOR

Dr. Miguel Ángel Barrena Gurbillón PRESIDENTE

Mg. Julio Mariano Chávez Milla SECRETARIO

MscM. Yuri Reina Marín VOCAL

vi

## **CONTENIDO**

| DEDIC       | ATC  | ORIA   | . i        |
|-------------|--|--|------------|
| AGRAI       | DEC  | IMIENTO  | ii         |
| AUTO        | RIDA   | ADES DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL TORIBIO RODRIGUEZ                                |            |
| DE ME       | ND(  | DZA DE AMAZONAS  | iii        |
| VISTO       | BUI  | ENO DEL ASESOR   | iv         |
| DECLA       | ARA  | CIÓN JURADA DE NO PLAGIO   | v          |
| JURAD       | O E  | VALUADOR   | vi         |
| CONTI       | ENII   | 0  | <b>'ii</b> |
| ÍNDICI      | E DE   | TABLAS   | ix         |
| ÍNDICI      | E DE   | E FIGURAS  | X          |
| RESUN       | /IEN   | X  | iii        |
| ABSTR       | RAC  | Гх   | iv         |
| I.          | INT  | FRODUCCIÓN   | 1          |
| II.         | MA   | ATERIAL Y MÉTODOS  | .3         |
| 2.1.        | Ma   | terial y equipos   | 3          |
| 2.1.        | 1.   | Material biológico   | 3          |
| 2.1.        | 2.   | Equipos de laboratorio   | 3          |
| 2.2.        | Pob  | lación y muestra   | 3          |
| 2.3.        | Me   | todología  | 5          |
| 2.3.        | 1.   | Recolección y preparación de las muestras  | 5          |
| 2.3.        | 2.   | Análisis de parámetros fisicoquímicos  | 5          |
| 2.3.<br>cer | .3.<br>cano  | Recolección de las señales espectrales de espectroscopia de infrarrojo<br>(NIRS) | 6          |
| 2.3.        | 4.   | Adquisición de imágenes hiperespectrales (HSI)                                   | . 6        |
| 2.3.        | 5.   | Preprocesamiento espectral   | . 8        |
| 2.4.        | Мо   | delado   | . 8        |
| 2.5.        | Val  | idación de los modelos   | . 9        |
| III.        | RE   | SULTADOS   | 10         |
| 3.1.        | Par  | ámetros fisicoquímicos   | 10         |
| 3.2.        | Señales espectrales                                    |  |            |
| 3.3.        | Selección de variables latentes y longitudes de onda11 |  |            |
| 3.4.        | Modelos PLSR para el rango HSI27                       |  |            |
| 3.5.        | Мо   | delos PLSR para el rango NIRS  | 27         |
| 3.6.        | Cor  | nparación de rangos del espectro electromagnético                                | 28         |

| IV.  | DISCUSIÓN   |  |
|------|---|--|
| 4.1. | Caracterización fisicoquímica de la cáscara de café |  |
| 4.2. | Rango espectral para humedad                        |  |
| 4.3. | Rango espectral para proteína                       |  |
| 4.4. | Rango espectral para extracto etéreo                |  |
| 4.5. | Rango espectral para fibra cruda                    |  |
| 4.6. | Rango espectral para FDN y FDA                      |  |
| 4.7. | Rango espectral para extracto libre de nitrógeno    |  |
| 4.8. | Rango espectral para cenizas y energía              |  |
| V.   | CONCLUSIONES  |  |
| VI.  | RECOMENDACIONES                                     |  |
| VII. | REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS                          |  |
| ANEX | OS  |  |

# ÍNDICE DE TABLAS

| Tabla 1. Metodologías usadas para los análisis bromatológicos5  |
|---|
| Tabla 2. Resultados de los parámetros fisicoquímicos. 10  |
| Tabla 3. Relevancia de las longitudes de onda (nm) seleccionadas por el modelo en cada      parámetro para los rangos de HSI y NIRS22 |
| Tabla 4. Ecuaciones para predecir los valores bromatológicos de cáscara de café en el rango [400 – 1000]nm (HSI)23                    |
| Tabla 5. Ecuaciones para predecir los valores bromatológicos de cáscara de café en el rango [1100 – 2500]nm (NIRS)25                  |
| Tabla 6. Resultados de calibración y validación de los modelos del rango espectral de 400nm – 1000nm27                                |
| Tabla 7. Resultados de calibración y validación de los modelos en el rango 1100nm –2500nm28   |

# ÍNDICE DE FIGURAS

| Figura 1. Mapa de distritos donde se realizó el muestreo de cáscara de café 4                             |
|---|
| Figura 2. Fotografía y esquema del sistema de adquisición de imágenes hiperespectrales                    |
| (HSI). Adaptado de Vásquez et al. (2018) 7  |
| Figura 3. a. HSI principal, b. Imagen seleccionada con la región de interés 8                             |
| Figura 4. Señales espectrales del rango HSI11   |
| Figura 5. Señales espectrales del rango NIR11   |
| Figura 6. Longitudes de onda relevantes para humedad13  |
| Figura 7. Longitudes de onda relevantes para proteína14   |
| Figura 8. Longitudes de onda relevantes para extracto etéreo15  |
| Figura 9. Longitudes de onda relevantes para fibra cruda16  |
| Figura 10. Longitudes de onda relevantes para cenizas 17  |
| Figura 11. Longitudes de onda relevantes para extracto libre de nitrógeno (ELN)18                         |
| Figura 12. Longitudes de onda relevantes para fibra detergente neutra (FDN)19                             |
| Figura 13. Longitudes de onda relevantes para fibra detergente ácida (FDA) 20                             |
| Figura 14. Longitudes de onda relevantes para energía21   |
| Figura 15. Valores del coeficiente de determinación (R <sup>2</sup> ) para predicción de los modelos - 29 |
| Figura 16. Valores del error cuadrático medio (RMSE) para predicción de los modelos 29                    |
| Figura 17. Número de longitudes de onda seleccionadas para humedad 44                                     |
| Figura 18. Número de longitudes de onda seleccionadas para proteína45                                     |
| Figura 19. Número de longitudes de onda seleccionadas para extracto etéreo46                              |
| Figura 20. Número de longitudes de onda seleccionadas para fibra cruda 47                                 |
| Figura 21. Número de longitudes de onda seleccionadas para cenizas48                                      |
| Figura 22. Número de longitudes de onda seleccionadas para extracto libre de nitrógeno                    |
| (ELN)49   |
| Figura 23. Número de longitudes de onda seleccionadas para fibra detergente neutra (FDN).                 |
| 50  |
| Figura 24. Número de longitudes de onda seleccionadas para fibra detergente ácida (FDA).                  |
| 51  |
| Figura 25. Número de longitudes de onda seleccionadas para energía 52                                     |
| Figura 26. Comparación entre valores reales y predichos para humedad en el rango HSI 53                   |
| Figura 27. Comparación entre valores reales y predichos para humedad en el rango NIRS.53                  |
| Figura 28. Comparación entre valores reales y predichos para proteína en el rango HSI 54                  |
| Figura 29. Comparación entre valores reales y predichos para proteína en el rango NIRS. 54                |

| Figura 30. Co  | omparación entre valores reales y predichos para extracto etéreo en el rango      |
|----------------|---|
| Figura 31. Co  | omparación entre valores reales y predichos para extracto etéreo en el rango      |
| Figura 32. Cc  | omparación entre valores reales y predichos para fibra cruda en el rango HSI.     |
| Figura 33. Co  | omparación entre valores reales y predichos para fibra cruda en el rango NIRS.    |
| Figura 34. Co  | omparación entre valores reales y predichos para cenizas en el rango HSI 57       |
| Figura 35. Co  | omparación entre valores reales y predichos para cenizas en el rango NIRS 57      |
| Figura 36. Co  | omparación entre valores reales y predichos para ELN en el rango HSI 58           |
| Figura 37. Co  | omparación entre valores reales y predichos para ELN en el rango NIRS 58          |
| Figura 38. Co  | omparación entre valores reales y predichos para FDN en el rango HSI 59           |
| Figura 39. Co  | omparación entre valores reales y predichos para FDN en el rango NIRS 59          |
| Figura 40. Co  | omparación entre valores reales y predichos para FDA en el rango HSI 60           |
| Figura 41. Co  | omparación entre valores reales y predichos para FDA en el rango NIRS 60          |
| Figura 42. Co  | omparación entre valores reales y predichos para energía en el rango HSI 61       |
| Figura 43. Co  | omparación entre valores reales y predichos para energía en el rango NIRS 61      |
| Figura 44. Pla | anta de <i>Coffea arabica</i> variedad Típica, Lonya Grande-Utcubamba62           |
| Figura 45. Co  | osecha de Coffea arabica variedad típica, Omia -Rodríguez de Mendoza 62           |
| Figura 46. Re  | colección de muestras de cáscara de café. Caserío Nueva York, Lonya               |
| Grande-Utcul   | bamba 63  |
| Figura 47. De  | espulpado de <i>Coffea arabica</i> variedad caturra. Omia - Rodríguez de Mendoza. |
|                | 63  |
| Figura 48. Mo  | olino ultracentrífugo (RETSCH ZM200) utilizado para moler las muestras de         |
| cáscara de cat | fé. Laboratorio de suelos y aguas64   |
| Figura 49. M   | uestra molida de cáscara de café64  |
| Figura 49. Al  | macenamiento de muestras de cáscara de café a temperatura ambiente 65             |
| Figura 50. Ca  | aptura de Imágenes Hiperespectrales65   |
| Figura 51. Re  | eporte de medición de energía de la bomba calorimétrica66                         |
| Figura 53. Cá  | ápsula para colocar las muestras en el equipo NIRS. a. Cápsula con la cubierta;   |
| b. Capsula co  | n la muestra de cáscara de café (zona de la incidencia de la luz infrarroja)66    |
| Figura 52. Ca  | aptura de perfiles espectrales NIR67  |
| Figura 54. Ta  | bla de perfiles espectrales en Excel68  |
| Figura 55. Mo  | odelación y validación en Matlab 2015 <sup>a</sup> 68                             |

#### RESUMEN

El objetivo de este estudio fue evaluar la capacidad de dos rangos del espectro electromagnético para ser usados en la predicción de las características fisicoquímica de la cáscara de café. Las muestras de cáscara de café se recogieron de dos lugares (Utcubamba y Rodriguez de Mendoza, subdivididas en tres variedades (catimor, caturra y típica), y tres periodos post-cosecha (menor a 24h, de 24 a 48h y más 48h), seleccionando 54 muestras en total. Las muestras se deshidrataron y molieron previo a su análisis proximal, después se adquirieron sus perfiles espectrales en los rangos [400 – 1000] nm y [1100 – 2500] nm. El modelado se realizó usando regresión de mínimos cuadrados parciales (PLSR). Se analizó las bondades de ajuste de los modelos con la validación y se determinó que los modelos para humedad, proteína, extracto libre de nitrógeno y fibra cruda, cenizas y energía muestran mejor capacidad predictiva en el rango espectral [1100 – 2500] nm. Los modelos para fibra detergente neutro (FDN), fibra detergente ácida (FDA) y extracto etéreo fueron más robustos en el rango [400 – 1000] nm. Se demostró que los rangos estudiados son viables para la predicción de las características fisicoquímicas de la cáscara de café.

Palabras Clave: Rango espectral; Espectro electromagnético; Imágenes Hiperespectrales; NIRS; PLSR.

#### ABSTRACT

The objective of this study was to evaluate the capacity of two ranges of the electromagnetic spectrum to be used in the prediction of the physicochemical characteristics of the coffee husk. The samples of coffee husk were collected from two places (Utcubamba and Rodríguez de Mendoza, subdivided into three varieties (catimor, caturra and tipica), and three post-processing periods (less than 24h, from 24 to 48h and more than 48h), selecting 54 samples total. The samples were dehydrated and ground previus to a proximal analysis, then their spectral profiles were acquired in the ranges [400-1000] nm and [1100-2500] nm. The modeling was performed using partial least squares regression (PLSR). We analyzed the goodness of fit of the models with the validation and determined that the models for humidity, protein, nitrogen-free extract and crude fiber, ash and visible energy better predictive capacity in the spectral range [1100 - 2500] nm. The models for neutral detergent fiber (NDF), acid detergent fiber (ADF) and ether extract were more robust in the range [400 - 1000] nm. It was demonstrated that the ranges studied are viable for the prediction of the physicochemical characteristics of the coffee husk.

**Keywords**: Spectral range; Electromagnetic spectrum; Hyperspectral images; NIRS; PLSR.

## I. INTRODUCCIÓN

El espectro electromagnético está formado por microondas, luz infrarroja, luz visible, luz ultravioleta, rayos X y rayos gamma (Oliveira y Santos, 2016), de los cuales el rango visible [400 – 780]nm y el infrarrojo cercano [780 – 2500] nm (Bosoon y Renfu, 2015) son las regiones de mayor interés analítico (Feng *et al.*, 2013). Para usar los espectros electromagnéticos se han implementado tecnologías como las imágenes hiperespectrales (HSI) y/o espectroscopia del infrarrojo cercano (NIRS), las cuales son capaces de medir los componentes químicos y atributos físicos de los productos agroalimentarios (Wu y Sun, 2013), con la ventaja de no ser destructivas y la muestra se prepara con facilidad (Huang *et al.*, 2014). Es conveniente la evaluación de los rangos útiles del espectro electromagnético que posean las variables relevantes, y que brinden la información necesaria para predecir los componentes químicos de los insumos que se desee analizar.

Se han realizado algunos estudios sobre la capácidad predictiva de los rangos del espectro electromágnetico, con el uso de las tecnologias HSI y NIRS en diferentes productos alimentarios y agricolas. La capácidad predictiva se evalúa con análisis multivariante el que se basa en el uso de diferentes métodos estadísticos, matemáticos o gráficos, para el análisis de datos, cuando se consideran múltiples variables de forma simultánea (Martens y Martens, 2001), y es empleado para estimar las propiedades físico-químicas de una muestra, mediante la comparación de los espectros (valores de absorbancia o reflectancia) y los valores químicos obtenidos por metodologías tradicionales y validadas (Geladi, 2003).

En este sentido, Bagchi *et al.* (2016), predijeron el contenido de proteína del grano de arroz, usando una regresión de mínimos cuadrados parciales modificada (MPLSR), en el rango [1970 – 2490] nm, y obtuvieron un coeficiente de correlación ( $\mathbb{R}^2$ ) de 0,918 y un error estándar de predicción (SEP) de 0,432. En cambio para predecir proteína cruda de patata López *et al.* (2013), muestran que en el rango espectral [1100 – 2300]nm se tiene un coeficiente de correlación ( $\mathbb{R}^2$ P) de 0,88 y SEP de 0,75.

Diaz *et al.* (2014), estudiaron el rango de 400nm – 2500nm para predecir el contenido de humedad, proteína, fibra y almidón en camotes; mediante la regresión lineal múltiple (MLR), obteniendo  $R^2$  de 0,85; 0,69; 0,65 y 0,97 con SEP de 0,035; 0,004; 0,003 y 0,019

respectivamente. En otro estudio Zhao *et al.* (2016), demuestran que en el rango de 950nm – 1657nm existe la capacidad de predecir el contenido de grasa y humedad en insumos cárnicos, con la aplicación de regresión de mínimos cuadrados parciales (PLSR), obtuvieron valores R<sup>2</sup>P de 0,99 y 0,97, con RMSEP de 0,93 y 0,77 para grasa y humedad respectivamente. Núñez *et al.* (2012), estudiaron el rango [400 – 2498]nm, para predecir la composición química de las dietas y las heces de conejos, emplearon el análisis MPLSR y obtuvieron valores R<sup>2</sup> desde 0.73 a 0.95 para materia seca, materia orgánica, proteína cruda, fibra bruta y cenizas en las heces, y valores R<sup>2</sup> desde 0,92 a 0,95 para los mismos parámetros en las dietas suministradas.

Por otro lado, Castro *et al.* (2015), desarrollaron modelos de predicción del color y el contenido de humedad de café cerezo, mediante HSI en el rango [400 – 1000]nm donde los modelos fueron calculados con análisis PLSR y redes neuronales artificiales (ANN), donde obtuvieron los coeficientes de correlación de calibración (R<sup>2</sup>C) y R<sup>2</sup>P superiores a 0,90 para ANN, y entre 0,42 y 0,48 para los modelos PLSR. Para la cáscara de café no se encontraron evidencias en la caracterización de sus componentes en algún rango espectral con el uso de las tecnologías mencionadas.

La importancia de este trabajo radica en determinar los rangos del espectro electromagnético que tienen la capacidad para predecir valores de los análisis bromatológicos de los insumos alimenticios. Por lo tanto, se planteó como objetivo principal "Evaluar los rangos del espectro electromagnético para predecir la caracterización fisicoquímica de cáscara de café para alimentación animal" y como objetivos específicos: 1.- Obtener perfiles de intensidad de reflectancia para el rango [400 – 1000]nm y el rango [1100 – 2500]nm, 2.- Desarrollar los modelos para los diferentes rangos de longitud de onda en estudio mediante PLSR y 3.- Evaluar el ajuste del modelo para los diferentes rangos de longitud de onda en estudio de onda en estudio de la cáscara de café.

## II. MATERIAL Y MÉTODOS

#### 2.1. Material y equipos

#### 2.1.1. Material biológico

Como material biológico se utilizó cáscara de café procedente de las cuencas cafetaleras de Utcubamba y Rodriguez de Mendoza.

#### 2.1.2. Equipos de laboratorio

Para la fase de campo (recolección de las muestras) y la fase de laboratorio se contaron con los equipos siguientes:

- Dos cajas de conservación, con 8 geles de refrigeración.
- Molino ultracentrífugo (RETSCH ZM200, Alemania).
- Tamices (VWR, USA)
- Balanza analítica (Precisa, Suiza)
- Estufa (Ecocell, USA),
- Mufla (Thermo Scientific, USA)
- Bomba Calorimétrica (PARR INSTRUMENT, 6200, USA)
- Equipo Soxhlet (J. P. Selecta S. A., Det-Gras N, España)
- Determinador de fibras (FIWE, VELP, Italia)
- Equipo kjeldahl (JP Selecta, PRO- NITRO A, España)
- Equipo NIR (Unity Scientific, Feed Analyzer SpectraStar 2500xl, 2619, USA)
- Cámara de Imágenes Hiperespectrales (RESONON, USA).

#### 2.2. Población y muestra

Las tomó un total de 54 muestras de cáscara de café (*Coffea arabica*), de dos lugares de procedencia (Rodríguez de Mendoza y Utcubamba en la región Amazonas) (Figura 1), además se consideraron tres variedades de café (catimor, típica y caturra) y tres periodos posdespulpado (menos de 24 horas, de 24 a 48 horas y más de 48 horas), tomándose 3 repeticiones de cada combinación factorial.



Figura 1. Mapa de distritos donde se realizó el muestreo de cáscara de café.

#### 2.3. Metodología

#### 2.3.1. Recolección y preparación de las muestras

Las muestras de cáscara de café (*Coffea arabica*) se recogieron *in situ* de los lugares de estudio, se recolectaron 54 muestras de 500 g cada una. Luego, se transportaron hasta el Laboratorio de Nutrición Animal y Bromatología de Alimentos (NUTRILAB) de la Universidad Nacional Toribio Rodriguez de Mendoza de Amazonas en cajas térmicas con paquetes de gel refrigerante congelado (0°C). En el laboratorio se realizó el secado de las muestras (óptimo para realizar los análisis proximales) en la estufa (Memmert) a 65°C durante 24 horas, después se molieron todas las muestras en un molino ultracentrífugo (RETSCH ZM200) y finalmente se almacenaron en depósitos de plásticos con tapa a temperatura ambiente, hasta el momento en que se realizaron los análisis fisicoquímicos y la adquisición de los perfiles espectrales.

## 2.3.2. Análisis de parámetros fisicoquímicos

Los análisis bromatológicos se realizaron en el Laboratorio de Nutrición Animal y Bromatología de Alimentos (NUTRILAB) de la Universidad Nacional Toribio Rodríguez de Mendoza, siguiendo las metodologías que se muestran en la Tabla 1.

| Parámetro        | Metodología  | Autores                             |  |
|------------------|--------------|-------------------------------------|--|
| Humedad          | AOAC 930.15  | (AOAC, 1996)                        |  |
| Proteína         | AOAC 984.13  | (AOAC, 2012)                        |  |
| Extracto etéreo  | AOAC 920.39  | (AOAC, 1990a), (Thiex, Nancy J et   |  |
|                  |              | al., 2003)                          |  |
| Fibra cruda      | AOAC 962.09  | (AOAC, 1990b)                       |  |
| Cenizas          | AOAC 942.05  | (AOAC, 2000), (Thiex, Nancy et al., |  |
|                  |              | 2012)                               |  |
| $ELN^1$          | AOAC 923.03  | (AOAC, 2006b)                       |  |
| $FDN^2$          | AOAC 2002.04 | (Van Soest et al., 1991), (AOAC,    |  |
|                  |              | 2006c)                              |  |
| FDA <sup>3</sup> | AOAC 973.18  | (AOAC, 2006a)                       |  |
| Energía          | Calorimetría |                                     |  |

Tabla 1. Metodologías usadas para los análisis bromatológicos

<sup>1</sup> Extracto libre de nitrógeno. <sup>2</sup> Fibra detergente neutra, <sup>3</sup> Fibra detergente ácida

# 2.3.3. Recolección de las señales espectrales de espectroscopia de infrarrojo cercano (NIRS)

La toma de señales espectrales se realizó paralelamente al análisis fisicoquímico, con la finalidad que los resultados del colectivo de modelación y los valores químicos no varíen o difieran. Se recolectaron por quintuplicado los espectros de cada una de las 54 muestras de cáscara de café, en el rango de longitud de onda de [1100 – 2500] nm con un Unity Scientific (Feed Analyzer SpectraStar 2500xl-1, 2619, USA). Los 270 espectros se almacenaron en una base de datos de Excel (Unity Scientific, 2014)

#### 2.3.4. Adquisición de imágenes hiperespectrales (HSI)

Se utilizó un sistema de adquisición de imágenes (RESONON, USA). El sistema de HSI está compuesto de una cubierta exterior, plataforma de muestra, el sistema de iluminación, torre, computador, fuente de alimentación y software que es útil para la recolección de datos (Castro, 2010), como se muestra en la Figura 2. El sistema toma las imágenes de modo reflectancia para el rango de longitud de onda [400 – 1000]nm con una amplitud de 8nm tomando en total 76 lecturas en todo el rango espectral, y se manipularon las imágenes tomadas mediante el software Spectronon 2.62 (RESONON Inc. - USA). Se establecieron los parámetros del sistema para la adquisición de HSI y se calibró el sistema utilizando imágenes de referencia 1, blanco (W) y oscuro (D), que se adquirieron a partir de un patrón de teflón (valor de reflectancia~99,9%) y bloqueando la lente (reflectancia ~0,0%) (Vásquez et al., 2018). Las imágenes obtenidas se organizaron en una matriz tridimensional y se almacenaron en formato de extensión 'bil' (Banda intercalada por línea) (Huang et al., 2014), y para leer las imágenes, se generó la extensión 'hdr'.



Figura 2. Fotografía y esquema del sistema de adquisición de imágenes hiperespectrales (HSI). Adaptado de Vásquez *et al.* (2018).

## 2.3.4.1. Acondicionamiento de la muestra y recolección de imágenes

Se pesaron 10 g de harina de cáscara de café, en una caja de papel de 8cm x 4cm x 2 cm, posteriormente se homogenizó de tal manera que la superficie superior de la muestra quede nivelada y homogénea para capturar la imagen; luego se grabaron 5 imágenes hiperespectrales de cada una de las 54 muestras en estudio obteniendo en total 270 imágenes.

#### 2.3.4.2. Selección de la región de interés y extracción de perfiles

Después de grabar las imágenes, se extrajo la región de interés (Figura 3) en otro hipercubo de menor dimensión, luego se extrajo la media espectral de cada una de las imágenes seleccionadas con la región de importancia. Después se almacenaron todos los espectros en un libro Excel.xlsx. obteniendo un total de 270 perfiles espectrales.



Figura 3. a. HSI principal, b. Imagen seleccionada con la región de interés

#### 2.3.5. Preprocesamiento espectral

Se aplicó la técnica de suavización y diferenciación de Savitzky-Golay estimando el polinomio de segundo grado usando quince puntos (tamaño de ventana) y orden de derivación cero (Ravikanth *et al.*, 2015), a todos los perfiles espectrales NIRS y HSI. Todos los algoritmos de preprocesamiento espectral se realizaron con el software Matlab 2015a (MathWorks, Inc. USA).

#### 2.4. Modelado

Se empleó la regresión de mínimos cuadrados parciales (PLSR) para relacionar la composición química y los espectros NIR (variables de respuesta) con varias variables explicativas (Scholz *et al.*, 2014). Se comprimió la información espectral en factores ortogonales llamados variables latentes (LV) que tuvieron una mejor predicción, esto demostró ser adecuado con el número de variables (longitudes de onda) porque se

correlacionaron de una mejor manera con los valores reales de las muestras (Zhang, *et al.*, 2013). Para extraer un conjunto de calibración representativo, se dividieron automáticamente todas las muestras en subconjuntos (Xu *et al.*, 2016), para modelación se emplearon 104 perfiles espectrales. Los modelos se realizaron en Matlab 2015a (MathWorks, Inc. USA).

#### 2.5. Validación de los modelos

La validación consiste en la comparación del valor verdadero (valor químico) y el valor estimado (valor predicho por el modelo generado) (Casal, 2013), donde el rendimiento o valor predictivo del modelo se evalúa mediante el coeficiente de correlación (R<sup>2</sup>), error cuadrático medio de calibración (RMSEC) y validación (RMSEP o RMSEV) (Xuemei y Jianshe, 2013). Se utilizaron 166 perfiles espectrales para validación extraídas del total de muestras. Finalmente, se compararon los coeficientes de correlación en todos los modelos.

#### **III. RESULTADOS**

#### 3.1. Parámetros fisicoquímicos

Los valores obtenidos de los análisis fisicoquímicos de la cáscara de café se muestran en la

Tabla 2, en la cual se encuentran los valores promedio, la desviación estándar y el coeficiente de variación de cada uno de los parámetros analizados. La fibra cruda obtuvo un coeficiente de variación mayor de 21,71%, por el contrario, el parámetro de energía mostró un coeficiente de variación menor de 4,80%.

| Parámetro         | Valores promedio (%) | SD <sup>1</sup> | CV (%) <sup>2</sup> |
|-------------------|----------------------|-----------------|---------------------|
| Humedad           | 9,345                | 1,160           | 12,41               |
| Proteína          | 11,592               | 1,349           | 11,64               |
| Grasa             | 1,7503               | 0,224           | 12,82               |
| Fibra Cruda       | 19,450               | 4,222           | 21,71               |
| Cenizas           | 8,480                | 1,051           | 12,39               |
| ELN <sup>3</sup>  | 49,382               | 5,052           | 10,23               |
| $FDN^4$           | 52,963               | 5,596           | 10,57               |
| FDA <sup>5</sup>  | 44,764               | 6,344           | 14,17               |
| Energía (Mcal/Kg) | 4,3458               | 0,208           | 4,80                |

Tabla 2. Resultados de los parámetros fisicoquímicos.

<sup>1</sup> Desviación estándar. <sup>2</sup> Coeficiente de variación. <sup>3</sup> Extracto libre de nitrógeno. <sup>4</sup> Fibra detergente neutra. <sup>5</sup> Fibra detergente ácida.

#### **3.2.** Señales espectrales

La Figura 4 muestra los espectros de reflectancia adquiridos con HSI, en el rango [400 - 1000]nm más adelante llamado "rango HSI", y se observa la cantidad de luz reflejada (intensidad de brillo) a cada longitud de onda. La Figura 5 muestra los perfiles espectrales adquiridos con el equipo NIRS en el rango [1100 - 2500]nm llamado "rango NIRS", el Log (1/R) detalla la absorbancia de luz infrarroja de cada muestra, según la Ley de Beer la absorbancia está relacionada linealmente con la concentración de los compuestos químicos en las muestras (Gobrecht *et al.*, 2015).



Figura 4. Señales espectrales del rango HSI.



Figura 5. Señales espectrales del rango NIR.

#### 3.3. Selección de variables latentes y longitudes de onda

Se seleccionó el número de variables latentes en base a la explicación de la variable Y por las variables de X (valores de los perfiles espectrales), y el error cuadrático medio (RMSE) de cada parámetro en los rangos de HSI y NIRS. En la Tabla 3 se muestra el orden de importancia de las longitudes de

onda seleccionadas en la generación del modelo matemático para cada parámetro en el rango HSI y NIRS.

Para generar los modelos PLSR optimizados se utilizó las longitudes de onda relevantes y se elaboró ecuaciones en función de los valores de las longitudes de onda para los rangos [400 - 1000]nm y [1100 - 2500]nm tal como se muestra en la Tabla 4 y la Tabla 5. Para el modelo de humedad las longitudes de onda relevantes se encontraron agrupadas entre 528 - 632nm, 712 - 808nm y 880 - 920nm para el rango de HSI y entre 1314nm, 1409nm, 1624 - 1837nm y 2259 - 2452nm para el rango NIRS (Figura 6). En proteína se encuentran entre 400 - 536nm, 640nm, 704 - 728nm y 808 - 864nm para el rango HSI y entre 1343nm, 1463nm, 1676nm y 1837 - 2462nm para el rango NIRS (Figura 7). Para el extracto etéreo se seleccionaron las longitudes de onda entre 472 - 480nm, 584 - 680nm, 792nm y 872 - 936nm para el rango HSI y entre 1335 - 1409nm y 1959 - 2431nm para el rango NIRS (Figura 8).

Para la fibra cruda se seleccionaron las longitudes de onda entre 480 - 600nm, 658 - 696nm y 760 - 888nm para el rango de las HSI y entre 1147nm, 1336nm, 1437nm, 1729 - 1887nm, 2065nm y 2193 - 2440nm en el rango NIRS (Figura 9). El modelo para cenizas seleccionó las longitudes de onda entre 468nm, 544nm, 616 - 768nm y 840 - 928nm y las longitudes entre 1160nm, 1335nm, 1721 - 1745nm, 1910nm y 2094 - 2491nm para los rangos de HSI y NIRS respectivamente como se muestra en la Figura 10. En ELN las longitudes de onda relevantes se encuentran entre 504 - 888nm en el rango HSI y entre 1336nm, 1437nm, 1731 - 1889nm, 2022 - 2065nm y 2233 -2440nm para el rango NIRS (Figura 11).

El modelo de FDN selecciono las longitudes de onda relevantes entre 400nm, 480 - 616nm, 720 - 840nm y 920 - 936nm en la región HSI y en la región NIRS se seleccionaron las longitudes entre 1335 - 1373nm, 1684 - 2006nm y 2223 - 2495nm (Figura 12). Para el modelo de predicción de FDA generado en el rango de HSI seleccionó las longitudes de onda entre 400 - 696nm (visible) y para la región NIRS se seleccionaron las longitudes importantes entre 1374nm, 1725nm y 1899 - 2424nm como se muestra en la Figura 13. El modelo de energía es explicado por las variables seleccionadas entre 488nm, 576 – 656nm y 736 – 928nm para el rango HSI, en cambio para el rango NIRS son tres rangos los más importantes 1345 – 1399nm, 1901 – 2034nm y 2245 – 2489nm (Figura 14).



Figura 6. Longitudes de onda relevantes para humedad.



Figura 7. Longitudes de onda relevantes para proteína.



Figura 8. Longitudes de onda relevantes para extracto etéreo.



Figura 9. Longitudes de onda relevantes para fibra cruda.



Figura 10. Longitudes de onda relevantes para cenizas.



Figura 11. Longitudes de onda relevantes para extracto libre de nitrógeno (ELN)



Figura 12. Longitudes de onda relevantes para fibra detergente neutra

(FDN)



Figura 13. Longitudes de onda relevantes para fibra detergente ácida (FDA).



Figura 14. Longitudes de onda relevantes para energía.
| Rango | Parámetros | 1    | 2    | 3    | 4    | 5    | 6    | 7    | 8    | 9    | 10   | 11   | 12   | 13   | 14   | 15   | 16   | 17   | 18   |
|-------|------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
|       | Humedad    | 880  | 888  | 576  | 920  | 912  | 760  | 568  | 560  | 584  | 712  | 528  | 632  | 768  | 808  |      |      |      |      |
|       | Proteína   | 808  | 528  | 496  | 400  | 520  | 840  | 488  | 728  | 864  | 720  | 504  | 704  | 536  | 448  | 640  |      |      |      |
|       | EE         | 936  | 912  | 792  | 896  | 872  | 680  | 888  | 880  | 928  | 584  | 480  | 616  | 472  | 904  |      |      |      |      |
|       | Fibra      | 768  | 888  | 824  | 840  | 696  | 656  | 792  | 680  | 872  | 504  | 560  | 528  | 880  | 600  | 576  | 480  | 760  | 832  |
| HSI   | Cenizas    | 728  | 680  | 872  | 736  | 840  | 752  | 704  | 632  | 760  | 648  | 720  | 768  | 616  | 544  | 928  | 464  | 656  | 744  |
|       | ELN        | 768  | 680  | 656  | 888  | 792  | 696  | 824  | 504  | 632  | 560  | 576  | 528  | 544  | 840  | 728  | 744  | 600  | 664  |
|       | FDN        | 936  | 584  | 928  | 920  | 608  | 560  | 600  | 840  | 616  | 576  | 536  | 744  | 400  | 784  | 480  | 720  |      |      |
|       | FDA        | 632  | 640  | 624  | 560  | 552  | 696  | 616  | 400  | 544  | 496  |      |      |      |      |      |      |      |      |
|       | Energía    | 896  | 888  | 624  | 872  | 904  | 928  | 816  | 768  | 632  | 840  | 736  | 488  | 656  | 592  | 576  |      |      |      |
|       | Humedad    | 1725 | 2335 | 2424 | 2303 | 2279 | 2351 | 2439 | 2313 | 2259 | 1314 | 1409 | 1683 | 1624 | 1837 | 2552 |      |      |      |
|       | Proteína   | 2300 | 1676 | 1343 | 1463 | 2337 | 1885 | 2452 | 2347 | 2148 | 1991 | 1837 | 2462 | 2443 | 2208 |      |      |      |      |
|       | EE         | 2282 | 2371 | 2418 | 2133 | 2145 | 1335 | 2303 | 2053 | 2362 | 1346 | 1959 | 2038 | 1409 | 2431 |      |      |      |      |
|       | Fibra      | 2257 | 1887 | 2234 | 2301 | 2283 | 1830 | 1819 | 1729 | 2378 | 1336 | 2334 | 1437 | 1147 | 2440 | 2065 | 2361 | 1765 | 2193 |
| NIRS  | Cenizas    | 2316 | 2491 | 1160 | 2291 | 2473 | 2375 | 2218 | 2462 | 2138 | 2214 | 2276 | 2094 | 2424 | 2156 | 1335 | 1910 | 1721 | 1745 |
|       | ELN        | 1889 | 2257 | 2283 | 2302 | 1875 | 2233 | 1830 | 1819 | 1731 | 2377 | 2361 | 2335 | 1437 | 1336 | 2022 | 2065 | 1765 | 2440 |
|       | FDN        | 2495 | 2333 | 1373 | 2006 | 1345 | 2257 | 2394 | 1723 | 2464 | 1684 | 1879 | 2295 | 1782 | 1335 | 2223 | 2306 |      |      |
|       | FDA        | 2361 | 2311 | 2424 | 1932 | 2415 | 1725 | 1374 | 2027 | 2274 | 2157 | 1899 | 2239 | 2083 | 2093 |      |      |      |      |
|       | Energía    | 1345 | 1931 | 2334 | 1984 | 2411 | 2489 | 2268 | 2301 | 2423 | 1399 | 2474 | 1901 | 2034 | 2245 |      |      |      |      |

Tabla 3. Relevancia de las longitudes de onda (nm) seleccionadas por el modelo en cada parámetro para los rangos de HSI y NIRS

EE= Extracto etéreo, ELN= Extracto libre de nitrógeno, FDN= Fibra detergente neutro, FDA=Fibra detergente ácida,

Referencias: Figura 6, Figura 7, Figura 8, Figura 9, Figura 10, Figura 11, Figura 12, Figura 13 y Figura 14.

| D             |  | Valores             | Valores de    |
|---------------|--|---------------------|---------------|
| Propiedad     | Ecuacion en funcion de $\lambda$   | de R <sup>2</sup> V | RMSEV         |
| Humedad       | $H(\%) = -4,023(Brillo\ a\ \lambda_{880}) - 0,094(Brillo\ a\ \lambda_{888}) + 0,159(Brillo\ a\ \lambda_{576}) + 0,494(Brillo\ a\ \lambda_{920}) + 0,159(Brillo\ a\ \lambda_{576}) + 0,494(Brillo\ a\ \lambda_{920}) + 0,094(Brillo\ a\ \lambda_{$  |                     |               |
|               | $0,030(Brillo\ a\ \lambda_{912}) - 0,076(Brillo\ a\ \lambda_{760}) + 0,172(Brillo\ a\ \lambda_{568}) + 0,042(Brillo\ a\ \lambda_{560}) -$  |                     | 84E-02        |
|               | $0,735(Brillo \ a \ \lambda_{584}) - 0,190(Brillo \ a \ \lambda_{712}) + 0,010(Brillo \ a \ \lambda_{528}) - 0,058(Brillo \ a \ \lambda_{632}) + 0,010(Brillo \ a \ \lambda_{512}) + 0,000(Brillo \ a \ \lambda_{512}) + 0,00$   | 0,0 9 0 9           | 0,12 02       |
|               | $0,049(Brillo\ a\ \lambda_{768}) - 0,207(Brillo\ a\ \lambda_{808}) - 0,003(Brillo\ a\ \lambda_{544}) + 0,407.$   |                     |               |
|               | $P(\%) = 4,415(Brillo \ a \ \lambda_{808}) + 0,018(Brillo \ a \ \lambda_{528}) - 0,648(Brillo \ a \ \lambda_{496}) - 0,421(Brillo \ a \ \lambda_{400}) + 0,018(Brillo \ a \ \lambda_{528}) - 0,648(Brillo \ a \ \lambda_{496}) - 0,421(Brillo \ a \ \lambda_{400}) + 0,018(Brillo \ a \ \lambda_{528}) - 0,648(Brillo \ a \ \lambda_{528})$  |                     |               |
| Proteína      | $0,054(Brillo\ a\ \lambda_{520}) - 0,014(Brillo\ a\ \lambda_{840}) - 0,055(Brillo\ a\ \lambda_{488}) - 0,043(Brillo\ a\ \lambda_{728}) - $   | 0,7102              | 2,0E-01       |
|               | $0,177(Brillo \ a \ \lambda_{864}) + 0,035(Brillo \ a \ \lambda_{720}) + 0,267(Brillo \ a \ \lambda_{504}) + 0,691(Brillo \ a \ \lambda_{704}) - 0,000(Brillo \ a \ \lambda_{704}) + 0,00$   | ,                   | ,             |
|               | $\frac{0,082(Brillo\ a\ \lambda_{536})+0,427(Brillo\ a\ \lambda_{448})-0,038(Brillo\ a\ \lambda_{640})-0,006.}{0.001(D-10)}$   |                     |               |
| Extracto      | $EE(\%) = 1,132(Brillo \ a \ \lambda_{936}) - 0,002(Brillo \ a \ \lambda_{912}) + 0,021(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{896}) + 0,021(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{896}) + 0,021(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{896}) + 0,021(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{896}) + 0,021(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{896}) + 0,021(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{896}) + 0,021(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{896}) + 0,021(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{896}) + 0,021(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{896}) + 0,021(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{896}) + 0,021(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{896}) + 0,021(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{896}) + 0,021(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{896}) + 0,021(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{896}) + 0,021(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{896}) + 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{896}) + 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{896}) + 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,005(Brillo \ a \ \lambda_{792}$  |                     |               |
| Extracto      | $0,033(Brillo \ a \ \lambda_{872}) = 0,024(Brillo \ a \ \lambda_{680}) = 0,002(Brillo \ a \ \lambda_{888}) = 0,011(Brillo \ a \ \lambda_{880}) + 0.024(Brillo \ a \ \lambda_{880}) = 0.011(Brillo \ a \ \lambda_{880}) + 0.024(Brillo \ a \ \lambda_{880}) = 0.011(Brillo \ a \ \lambda_{880}) = 0.01$   |                     | 3,1E-02       |
| etéreo        | $0,026(Brillo\ a\ \lambda_{928}) = 0,011(Brillo\ a\ \lambda_{584}) = 0,010(Brillo\ a\ \lambda_{480}) + 0,034(Brillo\ a\ \lambda_{616}) + 0,011(Brillo\ a\ \lambda_{616}) + $   |                     |               |
|               | $0,011(Brillo \ a \ \lambda_{472}) = 0,031(Brillo \ a \ \lambda_{904}) = 0,029.$   |                     |               |
|               | $FC(\%) = 4,982(Brillo \ a \ \lambda_{768}) + 0,692(Brillo \ a \ \lambda_{888}) - 0,434(Brillo \ a \ \lambda_{824}) + 0,390(Brillo \ a \ \lambda_{840}) - 0,434(Brillo \ a \ \lambda_{824}) + 0,390(Brillo \ a \ \lambda_{840}) - 0,434(Brillo \ a \ \lambda_{840}) + 0,434(Brillo \ a \ \lambda_{840}$  |                     |               |
| Eilana ann da | $1,012(Brillo \ a \ \lambda_{696}) + 0,103(Brillo \ a \ \lambda_{656}) - 0,198(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,426(Brillo \ a \ \lambda_{680}) + 0.204(Brillo \ a \ \lambda_{696}) - 0.000(Brillo \ a \ \lambda_{656}) - 0,198(Brillo \ a \ \lambda_{792}) - 0,426(Brillo \ a \ \lambda_{680}) + 0.000(Brillo \ a \ \lambda_{680}) + 0.00$   | 0.6600              | 4,4E-01       |
| Fibra cruda   | $0,204(Brillo\ a\ \lambda_{872}) = 0,060(Brillo\ a\ \lambda_{504}) + 0,162(Brillo\ a\ \lambda_{560}) + 0,13(Brillo\ a\ \lambda_{528}) = 0.247(Brillo\ a\ \lambda_{1}) + 0.721(Brillo\ a\ \lambda_{1}) + 0.112(Brillo\ a\ \lambda_{1}) = 0.000(Brillo\ a\ \lambda_{1}) + 0.000(Bri$                   | 0,0099              |               |
|               | $0,34/(Btillo \ a \ \lambda_{880}) + 0,721(Btillo \ a \ \lambda_{600}) + 0,112(Btillo \ a \ \lambda_{576}) - 0,808(Btillo \ a \ \lambda_{480}) + 0,004(Btillo \ a \ \lambda_{10}) + 0,004(Btil$   |                     |               |
|               | $0,094(Btillo a \lambda_{760}) = 0,404(Btillo a \lambda_{832}) + 0,509.$   |                     |               |
| Cenizas       | $C(\%) = 15,122(Brillo a \lambda_{728}) + 1,144(Brillo a \lambda_{680}) - 0,920(Brillo a \lambda_{872}) - 0,093(Brillo a \lambda_{736}) - 0,093(Br$                  |                     |               |
|               | $0,051(BTIII0 a \lambda_{840}) + 0,121(BTIII0 a \lambda_{752}) + 0,701(BTIII0 a \lambda_{704}) + 0,012(BTIII0 a \lambda_{632}) - 0.261(Brillo a \lambda_{100}) + 0.260(Brillo a \lambda_{100}) + 0.242(Brillo a \lambda_{100}) + 0.740(Brillo a \lambda_{100}) + 0.260(Brillo a \lambda$             | 0.2170              | $1.4 \pm 0.1$ |
|               | $0,501(Brillo a \lambda_{760}) = 0,309(Brillo a \lambda_{648}) = 0,242(Brillo a \lambda_{720}) = 0,740(Brillo a \lambda_{768}) = 0.215(Brillo a \lambda_{10}) + 0.129(Brillo a \lambda_{10}) = 0.016(Brillo a \lambda_{10}) + 0.020(Brillo a $ |                     | 1,4E-01       |
|               | $0,215(BT lll0 a \lambda_{616}) + 0,126(BT lll0 a \lambda_{544}) - 0,016(BT lll0 a \lambda_{928}) + 0,029(BT lll0 a \lambda_{464}) + 0,009(BT lll0 a \lambda_{10}) + 0,001(BT ill0 a \lambda_{10}) - 0,126$  |                     |               |
|               | $0,000(D11100 u \lambda_{656}) + 0,991(D11100 u \lambda_{744}) = 0,120.$   |                     |               |

Tabla 4. Ecuaciones para predecir los valores bromatológicos de cáscara de café en el rango [400 – 1000]nm (HSI)

Donde: Brillo a = los valores de brillo de los perfiles espectrales del rango HSI

Referencia: Figura 26, Figura 28, Figura 30, Figura 32 y Figura 34

| Propiedad                     | Ecuación en función de $\lambda$   | Valores             | Valores de |
|-------------------------------|--|---------------------|------------|
|                               |  | de R <sup>2</sup> V | RMSEV      |
| Extracto libre de nitrógeno   | $\begin{split} ELN(\%) &= 84,060(Brillo\ a\ \lambda_{768}) - 1,807(Brillo\ a\ \lambda_{680}) - 1,014(Brillo\ a\ \lambda_{656}) - 3,113(Brillo\ a\ \lambda_{888}) - \\ & 0,154(Brillo\ a\ \lambda_{792}) + 1,772(Brillo\ a\ \lambda_{696}) - 0,460(Brillo\ a\ \lambda_{824}) - 1,174(Brillo\ a\ \lambda_{504}) - \\ & 0,702(Brillo\ a\ \lambda_{632}) + 0,831(Brillo\ a\ \lambda_{560}) - 2,003(Brillo\ a\ \lambda_{576}) + 2,779(Brillo\ a\ \lambda_{528}) + \\ & 1,325(Brillo\ a\ \lambda_{544}) - 0,389(Brillo\ a\ \lambda_{840}) + 0,794(Brillo\ a\ \lambda_{728}) - 0,077(Brillo\ a\ \lambda_{744}) + \\ & 0,784(Brillo\ a\ \lambda_{600}) - 1,221(Brillo\ a\ \lambda_{664}) + 3,812. \end{split}$ | 0,6031              | 1,0E+00    |
| Fibra<br>detergente<br>neutra | $ \begin{array}{l} FDN(\%) = 29,070(Brillo\ a\ \lambda_{936}) - 0,382(Brillo\ a\ \lambda_{584}) + 3,686(Brillo\ a\ \lambda_{928}) + 0,422(Brillo\ a\ \lambda_{920}) - \\ 0,010(Brillo\ a\ \lambda_{608}) - 1,211(Brillo\ a\ \lambda_{560}) + 1,000(Brillo\ a\ \lambda_{600}) - 1,063(Brillo\ a\ \lambda_{840}) - \\ 0,051(Brillo\ a\ \lambda_{616}) + 0,702(Brillo\ a\ \lambda_{576}) - 2,852(Brillo\ a\ \lambda_{536}) - 0,304(Brillo\ a\ \lambda_{744}) - \\ 0,538(Brillo\ a\ \lambda_{400}) + 0,131(Brillo\ a\ \lambda_{784}) + 0,171(Brillo\ a\ \lambda_{480}) - 0,164(Brillo\ a\ \lambda_{720}) + 0,486. \end{array} $  | 0,7664              | 2,0E-01    |
| Fibra<br>detergente<br>ácida  | $\begin{split} FDA(\%) &= 22,157 (Brillo \ a \ \lambda_{632}) - 1,187 (Brillo \ a \ \lambda_{640}) - 0,054 (Brillo \ a \ \lambda_{624}) + 1,855 (Brillo \ a \ \lambda_{560}) - \\ & 1,250 (Brillo \ a \ \lambda_{552}) + 3,112 (Brillo \ a \ \lambda_{696}) + 0,129 (Brillo \ a \ \lambda_{616}) - 0,841 (Brillo \ a \ \lambda_{400}) + \\ & 0,098 (Brillo \ a \ \lambda_{544}) - 1,740 (Brillo \ a \ \lambda_{496}) - 0,097. \end{split}$   | 0,8922              | 3,6E-01    |
| Energía                       | $ \begin{split} E(Mcal/Kg) &= 5,274(Brillo\ a\ \lambda_{896}) + 0,018(Brillo\ a\ \lambda_{888}) - 0,028(Brillo\ a\ \lambda_{624}) - 0,005(Brillo\ a\ \lambda_{872}) + \\ & 0,003(Brillo\ a\ \lambda_{904}) - 0,002(Brillo\ a\ \lambda_{928}) + 0,004(Brillo\ a\ \lambda_{816}) - 0,012(Brillo\ a\ \lambda_{768}) + \\ & 0,015(Brillo\ a\ \lambda_{632}) + 0,055(Brillo\ a\ \lambda_{840}) + 0,009(Brillo\ a\ \lambda_{736}) + 0,0002(Brillo\ a\ \lambda_{488}) + \\ & 0,003(Brillo\ a\ \lambda_{656}) - 0,040(Brillo\ a\ \lambda_{592}) - 0,021(Brillo\ a\ \lambda_{576}) + 0,002. \end{split} $   | 0,2853              | 2,1E-02    |

Continuación de tabla 4. Ecuaciones para predecir los valores bromatológicos de cáscara de café en el rango [400 – 1000]nm (HSI)

Donde: Brillo a = los valores de brillo de los perfiles espectrales del rango HSI

Referencias: Figura 36, Figura 38, Figura 40 y Figura 42

| Propiedad o<br>parámetro | Ecuación en función de λ   | Valores<br>de R <sup>2</sup> V | Valores de<br>RMSEV |
|--------------------------|--|--------------------------------|---------------------|
| Humedad                  | $\begin{split} H(\%) &= -0,173(Abs\ a\ \lambda_{1725}) + 740,698(Abs\ a\ \lambda_{2335}) + 118,819(Abs\ a\ \lambda_{2424}) + 392,899(Abs\ a\ \lambda_{2303}) - \\ & 136,450(Abs\ a\ \lambda_{2279}) - 723,341(Abs\ a\ \lambda_{2351}) - 116,288(Abs\ a\ \lambda_{2439}) - 572,872(Abs\ a\ \lambda_{2313}) + \\ & 913,508(Abs\ a\ \lambda_{2259}) + 676,010(Abs\ a\ \lambda_{1314}) + 983,002(Abs\ a\ \lambda_{1409}) + 922,800(Abs\ a\ \lambda_{1683}) - \\ & 617,029(Abs\ a\ \lambda_{1624}) - 211,122(Abs\ a\ \lambda_{1837}) - 257,734(Abs\ a\ \lambda_{2552}) + 515,927. \end{split}$  | 0,7024                         | 4,6E-02             |
| Proteína                 | $\begin{split} P(\%) &= 3,186(Abs\ a\ \lambda_{2300}) - 257,296(Abs\ a\ \lambda_{1676}) - 70,043(Abs\ a\ \lambda_{1343}) - 59,939(Abs\ a\ \lambda_{1463}) + \\ & 40,075(Abs\ a\ \lambda_{2337}) + 1058,503(Abs\ a\ \lambda_{1885}) - 375,205(Abs\ a\ \lambda_{2452}) - 1267,661(Abs\ a\ \lambda_{2347}) - \\ & 820,156(Abs\ a\ \lambda_{2148}) - 535,176(Abs\ a\ \lambda_{1991}) + 112,635(Abs\ a\ \lambda_{1837}) + 354,625(Abs\ a\ \lambda_{2462}) + \\ & 822,774(Abs\ a\ \lambda_{2443}) + 370,514(Abs\ a\ \lambda_{2208}) + 629,594 . \end{split}$   | 0,7707                         | 7,7E-03             |
| Extracto<br>etéreo       | $\begin{split} EE(\%) &= 0,422(Abs\ a\ \lambda_{2282}) + 97,879(Abs\ a\ \lambda_{2371}) + 130,062(Abs\ a\ \lambda_{2418}) - 37,587(Abs\ a\ \lambda_{2133}) - \\ & 326,674(Abs\ a\ \lambda_{2145}) + 367,608(Abs\ a\ \lambda_{1335}) + 18,899(Abs\ a\ \lambda_{2303}) - 71,570(Abs\ a\ \lambda_{2053}) + \\ & 207,533(Abs\ a\ \lambda_{2362}) - 44,946(Abs\ a\ \lambda_{1346}) - 41,988(Abs\ a\ \lambda_{1959}) + 81,372(Abs\ a\ \lambda_{2038}) - \\ & 352,928(Abs\ a\ \lambda_{1409}) + 48,053(Abs\ a\ \lambda_{2431}) - 75,502 \end{split}$  | 0,4085                         | 1,3E-02             |
| Fibra cruda              | $ \begin{split} FC(\%) &= 43,182(Abs\ a\ \lambda_{2257}) - 811,461(Abs\ a\ \lambda_{1887}) + 715,760(Abs\ a\ \lambda_{2234}) + 1472,622(Abs\ a\ \lambda_{2301}) - \\ & 1490,623(Abs\ a\ \lambda_{2283}) + 1494,963(Abs\ a\ \lambda_{1830}) - 2006,307(Abs\ a\ \lambda_{1819}) + 1486,001(Abs\ a\ \lambda_{1729}) + \\ & 3533,107(Abs\ a\ \lambda_{2378}) - 296,185(Abs\ a\ \lambda_{1336}) + 252,215(Abs\ a\ \lambda_{2334}) - 130,419(Abs\ a\ \lambda_{1437}) - \\ & 215,788(Abs\ a\ \lambda_{1147}) - 160,828(Abs\ a\ \lambda_{2440}) - 275,106(Abs\ a\ \lambda_{2065}) + 54,873(Abs\ a\ \lambda_{2361}) + \\ & 702,939(Abs\ a\ \lambda_{1765}) - 3763,620(Abs\ a\ \lambda_{2193}) - 602,291 \end{split} $         | 0,6925                         | 5,2E-02             |
| Cenizas                  | $\begin{split} \mathcal{C}(\%) &= 16,422(Abs\ a\ \lambda_{2316}) - 617,044(Abs\ a\ \lambda_{2491}) - 1295,546(Abs\ a\ \lambda_{1160}) - 68,556(Abs\ a\ \lambda_{2291}) + \\ & 491,978(Abs\ a\ \lambda_{2473}) + 1296,789(Abs\ a\ \lambda_{2375}) + 844,481(Abs\ a\ \lambda_{2218}) - 5624,841(Abs\ a\ \lambda_{2462}) + \\ & 160,810(Abs\ a\ \lambda_{2138}) + 4258,942(Abs\ a\ \lambda_{2214}) + 5470,567(Abs\ a\ \lambda_{2276}) - 44,847(Abs\ a\ \lambda_{2094}) - \\ & 1555,608(Abs\ a\ \lambda_{2424}) - 583,894(Abs\ a\ \lambda_{2156}) - 2954,678(Abs\ a\ \lambda_{1335}) + 184,956(Abs\ a\ \lambda_{1910}) + \\ & 121,382(Abs\ a\ \lambda_{1721}) - 1455,087(Abs\ a\ \lambda_{1745}) + 1402,253 \end{split}$ | 0,5476                         | 6,7E-02             |

Tabla 5. Ecuaciones para predecir los valores bromatológicos de cáscara de café en el rango [1100 – 2500]nm (NIRS)

Donde: Abs a = los valores de absorbancia de los perfiles espectrales del rango NIRS

Referencia: Figura 27, Figura 29, Figura 31, Figura 33 y Figura 35

| Propiedad o<br>parámetro      | Ecuación en función de $\lambda$   | Valores<br>de R <sup>2</sup> V | Valores<br>de<br>RMSEV |
|-------------------------------|--|--------------------------------|------------------------|
| Extracto libre de nitrógeno   | $\begin{split} ELN(\%) &= 14,940(Abs\ a\ \lambda_{1889}) - 1455,782(Abs\ a\ \lambda_{2257}) + 238,048(Abs\ a\ \lambda_{2283}) - 929,433(Abs\ a\ \lambda_{2302}) + \\ & 2148,761(Abs\ a\ \lambda_{1875}) - 2267,092(Abs\ a\ \lambda_{2233}) - 1144,669(Abs\ a\ \lambda_{1830}) - 3955,890(Abs\ a\ \lambda_{1819}) + \\ & 12258,917(Abs\ a\ \lambda_{1731}) - 2317,961(Abs\ a\ \lambda_{2377}) + 965,623(Abs\ a\ \lambda_{2361}) - 3451,891(Abs\ a\ \lambda_{2335}) + \\ & 1194,973(Abs\ a\ \lambda_{1437}) + 672,916(Abs\ a\ \lambda_{1336}) - 186,416(Abs\ a\ \lambda_{2022}) + 1081,060(Abs\ a\ \lambda_{2065}) - \\ & 501,514(Abs\ a\ \lambda_{1765}) - 2942,789(Abs\ a\ \lambda_{2440}) + 683,706. \end{split}$ | 0,7480                         | 2,2E-02                |
| Fibra<br>detergente<br>neutra | $\begin{split} FDN(\%) &= 59,346(Abs\ a\ \lambda_{2495}) + 2617,116(Abs\ a\ \lambda_{2333}) + 2657,682(Abs\ a\ \lambda_{1373}) + 201,239(Abs\ a\ \lambda_{2006}) - \\ & 585,418(Abs\ a\ \lambda_{1345}) - 648,206(Abs\ a\ \lambda_{2257}) - 1703,108(Abs\ a\ \lambda_{2394}) + 2031,636(Abs\ a\ \lambda_{1723}) - \\ & 4268,898(Abs\ a\ \lambda_{2464}) - 4577,899(Abs\ a\ \lambda_{1684}) + 1858,077(Abs\ a\ \lambda_{1879}) + 1037,364(Abs\ a\ \lambda_{2295}) + \\ & 4559,043(Abs\ a\ \lambda_{1782}) + 1987,408(Abs\ a\ \lambda_{1335})108,429(Abs\ a\ \lambda_{2223}) - 781,644(Abs\ a\ \lambda_{2306}) - \\ & 4538,403. \end{split}$   | 0,7548                         | 3,1E-01                |
| Fibra<br>detergente<br>ácida  | $\begin{split} FDA(\%) &= 96,887(Abs\ a\ \lambda_{2361}) + 2768,798(Abs\ a\ \lambda_{2311}) - 1262,661(Abs\ a\ \lambda_{2424}) - 4309,182(Abs\ a\ \lambda_{1932}) - \\ & 1208,433(Abs\ a\ \lambda_{2415}) + 3973,151(Abs\ a\ \lambda_{1725}) - 722,877(Abs\ a\ \lambda_{1374}) - 151,033(Abs\ a\ \lambda_{2027}) + \\ & 1755,008(Abs\ a\ \lambda_{2274}) - 863,376(Abs\ a\ \lambda_{2157}) - 549,440(Abs\ a\ \lambda_{1899}) + 899,682(Abs\ a\ \lambda_{2239}) - \\ & 529,045(Abs\ a\ \lambda_{2083}) - 7171,048(Abs\ a\ \lambda_{2093}) + 7309,439 \end{split}$   | 0,8288                         | 1,5E-01                |
| Energía                       | $ \begin{split} E \ (Mcal/Kg) &= 0.523 (Abs \ a \ \lambda_{1345}) - 47.320 (Abs \ a \ \lambda_{1931}) - 93.536 (Abs \ a \ \lambda_{2334}) + 114.329 (Abs \ a \ \lambda_{1984}) + \\ & 92.403 (Abs \ a \ \lambda_{2411}) + 163.409 (Abs \ a \ \lambda_{2489}) + 68.974 (Abs \ a \ \lambda_{2268}) - 64.229 (Abs \ a \ \lambda_{2301}) - \\ & 78.110 (Abs \ a \ \lambda_{2423}) - 308.109 (Abs \ a \ \lambda_{1399}) + 44.706 (Abs \ a \ \lambda_{2474}) + 42.837 (Abs \ a \ \lambda_{1901}) + \\ & 51.902 (Abs \ a \ \lambda_{2034}) - 40.944 (Abs \ a \ \lambda_{2245}) + 57.038 \end{split} $   | 0,4596                         | 1,8E-02                |

Continuación de la Tabla 5. Ecuaciones para predecir los valores bromatológicos de cáscara de café en el rango [1100 – 2500]nm (NIRS)

Donde: Abs a = los valores de absorbancia de los perfiles espectrales del rango NIRS

Referencias: Figura 37, Figura 39, Figura 41 y Figura 43

#### 3.4. Modelos PLSR para el rango HSI

La Tabla 6 muestra los coeficientes de determinación y error cuadrático medio para calibración y validación de los modelos PLSR optimizados, asimismo el número de variables latentes necesarias para predecir los parámetros de la cáscara de café, para el rango [400 – 1000]nm. Como se muestran los valores de ajuste, el modelo para FDA obtuvo los mejores valores de predicción, seguidamente el modelo para FDN es el segundo más importante dentro de este rango. En cambio, el modelo para cenizas fue el que menor valor de predicción presentó

Tabla 6. Resultados de calibración y validación de los modelos del rango espectral de 400nm – 1000nm

| Danámatna   | Variables | D <sup>2</sup> C | DMSEC            | <b>D</b> 2 <b>V</b> / | DMCEV   |  |
|-------------|-----------|------------------|------------------|-----------------------|---------|--|
| rarametro   | Latentes  | ĸĊ               | RNISEC           | ĸv                    |         |  |
| Humedad     | 15        | 75,0%            | 7,4E-13          | 59,7%                 | 8,4E-02 |  |
| Proteína    | 15        | 74,0%            | 2,4E-12          | 71,0%                 | 2,0E-01 |  |
| Extracto    | 14        | 56 20/           | 4 OF 14          | 44 70/                | 2 1E 02 |  |
| etéreo      | 14        | 30,3%            | 4,96-14          | 44,7%                 | 3,1E-02 |  |
| Fibra Cruda | 18        | 55,1%            | 5,6E-12          | 67,0%                 | 4,4E-01 |  |
| Cenizas     | 18        | 53,7%            | 2,8E-13          | 21,8%                 | 1,4E-01 |  |
| ELN         | 18        | 60,4%            | 1,4E-11          | 60,3%                 | 1,0E+00 |  |
| FDN         | 16        | 84,2%            | 3,2E-12          | 76,6%                 | 2,0E-01 |  |
| FDA         | 10        | 86,0%            | 1 <b>,2E-1</b> 1 | 89,2%                 | 3,6E-01 |  |
| Energía     | 15        | 36,3%            | 2,1E-13          | 28,5%                 | 2,1E-02 |  |

 $R^2C$  = Coeficiente de determinación para calibración. RMSEC = Error cuadrático medio para calibración.  $R^2V$  = Coeficiente de determinación para validación. RMSEV = Error cuadrático medio para validación. ELN = Extracto libre de nitrógeno. FDN = Fibra detergente neutra. FDA = Fibra detergente ácida.

## 3.5. Modelos PLSR para el rango NIRS

La Tabla 7 muestra los coeficientes de determinación, el error cuadrático medio para modelación y calibración; además, el número de variables latentes, de los modelos generados mediante PLSR para predecir los

componentes de la cáscara de café en el rango [1100 – 2500]nm. Donde, se detalla que el modelo para predecir FDA tiene los mejores valores de predicción, a diferencia de los modelos reportados para el rango HSI, el segundo modelo más importante en esta región espectral fue para proteína. Sin embargo, el modelo para extracto etéreo obtuvo los valores de ajuste más bajos.

| Parámetro   | Variables | R <sup>2</sup> C | RMSEC    | R <sup>2</sup> V | RMSEV   |  |
|-------------|-----------|------------------|----------|------------------|---------|--|
|             | Latentes  |                  |          |                  |         |  |
| Humedad     | 15        | 78.8%            | 3.5E-13  | 70.2%            | 4.6E-02 |  |
| Proteína    | 14        | 81.8%            | 6.7E-13  | 77.1%            | 7.7E-03 |  |
| Extracto    | 14        | 56 1%            | 2 /F 1/  | 40.8%            | 1 3E 02 |  |
| etéreo      | 14        | 50.170           | 2.412-14 | 40.870           | 1.51-02 |  |
| Fibra Cruda | 18        | 69.3%            | 4.7E-13  | 69.3%            | 5.2E-02 |  |
| Cenizas     | 18        | 68.5%            | 1.1E-12  | 54.8%            | 6.7E-02 |  |
| ELN         | 18        | 74.5%            | 2.0E-12  | 74.8%            | 2.2E-02 |  |
| FDN         | 16        | 80.0%            | 1.9E-12  | 75.5%            | 3.1E-01 |  |
| FDA         | 14        | 84.6%            | 2.4E-12  | 82.9%            | 1.5E-01 |  |
| Energía     | 14        | 48.3%            | 7.9E-14  | 46.0%            | 1.8E-02 |  |

Tabla 7. Resultados de calibración y validación de los modelos en el rango 1100nm – 2500nm.

 $R^2C$  = Coeficiente de determinación para calibración. RMSEC = Error cuadrático medio para calibración.  $R^2V$  = Coeficiente de determinación para validación. RMSEV = Error cuadrático medio para validación. ELN = Extracto libre de nitrógeno. FDN = Fibra detergente neutra. FDA = Fibra detergente ácida.

## 3.6. Comparación de rangos del espectro electromagnético

La Figura 15 muestra la comparación de los coeficientes de determinación de predicción de los modelos para los parámetros de la cáscara de café obtenidos en los rangos HSI y NIRS. Mientras que, la Figura 16 muestra el error cuadrático medio de predicción de todos los modelos obtenidos en los rangos espectrales HSI y NIRS.



Figura 15. Valores del coeficiente de determinación (R<sup>2</sup>) para predicción de los modelos



Figura 16. Valores del error cuadrático medio (RMSE) para predicción de los modelos

En consecuencia, el rango NIRS permite una mejor predicción de los valores de los parámetros evaluados de la cáscara de café seca y molida.

# IV. DISCUSIÓN

## 4.1. Caracterización fisicoquímica de la cáscara de café

La composición química de las muestras de cáscara de café (ver Tabla 2) refleja la proporción de sus componentes y la variabilidad que hay para cada uno. Para proteína se encontró  $11,592 \pm 1,349$  siendo un resultado estadísticamente similar a los reportes de Castillo *et al.* (2002) y Murthy y Madhava (2012), que muestran 11,20% y  $11,5\pm2,0\%$  de proteína respectivamente; siendo diferente al encontrado por Pandey *et al.* (2000) de 10% para proteína.

Los valores encontrados para grasa, fibra cruda, cenizas, ELN, FDN y FDA fueron  $1,7503 \pm 0.2243$ ;  $19,45 \pm 4,22$ ;  $8,48 \pm 1,051$ ;  $49,382 \pm 5,052$ ;  $52,963 \pm 5,596$  y  $4,3458 \pm 6,344$  respectivamente. Además, Pandey *et al.* (2000) indican que la cáscara de café contiene 18% de fibra cruda y 2,5% de grasa, en cambio para Ulloa *et al.* (2003), la cáscara de café contiene 2,9% de grasa y 8,9% de cenizas. Por otro lado, (Elías, 1978), reporto 44,4% de extracto libre de nitrógeno, 36,8% de FDN y 34,5% de FDA. Los reportes muestran valores estadísticamente similares a los encontrados en este estudio para ELN y fibra cruda y estadísticamente diferente para los contenidos de grasa, FDN y FDA.

#### 4.2. Rango espectral para humedad

Las longitudes de onda más relevantes para predecir humedad en el rango HSI se encontraron en tres rangos importantes; el primero muestra 4 longitudes juntas (560, 568, 576 y 584nm), el segundo rango es de 760 y 768nm, siendo los valores de longitudes de onda para determinar humedad (Wang *et al.*, 2017) y la tercera región comprende 880, 888, 912 y 920nm con estas longitudes de onda se obtuvieron valores de R<sup>2</sup>V de 0,597 y RMSEV de 0,083. Para Barbin *et al.* (2013), la longitud de onda de 927nm contiene información relevante para predecir humedad y Diaz *et al.* (2014), mencionan que las longitudes de onda que se les atribuye la bondad de sobretonos O-H son 926, 980 1095 y 1761, y son relacionados con la humedad. Según esta inferencia, el rango 880 – 920nm se mostraría como el más importante considerando que la banda 880nm fue la que brindó mayor información para el modelo como la variable con el pico más alto.

Por otro lado, para el rango NIRS las longitudes de onda se encuentran en cuatro rangos, el primero 1314nm, el segundo 1409, el tercero agrupa a las variables 1624, 1683, 1725 y 1837, y en el último grupo se muestran la mayor cantidad de variables 2259, 2279, 2303, 2313, 2335, 2351, 2424, 2439 y 2552nm, las cuales brindaron valores de performance para el modelo en R<sup>2</sup>V de 0,702 y RMSEV de 0,046. las longitudes de onda seleccionadas son diferentes a los establecidos por Heman y Hsieh (2016), quienes explicaron que las longitudes de onda para detectar humedad en arroz fueron 905, 936, 925, 1015 y 499 nm en el rango 400-1050 nm y difieren a 900, 860, 970, 1610 y 830 nm cuando el rango es 400-2498 nm. Para el modelo generado en la región espectral NIR, las longitudes de onda con mayor aporte al modelo fueron 1725, 2335 y 2424nm, estas bandas estarían relacionadas con los enlaces O-H y los sobretonos que estos generan.

Los valores estadísticos de comparación para ambos modelos de predicción de humedad, muestran que hay mayor viabilidad de aplicación para el modelo generado en la región NIRS, sin discriminar el rango HSI debido a que también cuenta con valores de ajuste relevantes e importantes para cuantificar la humedad.

#### 4.3. Rango espectral para proteína

En el rango HSI, las longitudes de onda relevantes para proteína se encuentran en tres rangos importantes el primero abarca 400, 448, 488, 496, 504, 520, 528 y 536nm, el segundo rango es de 640, 704, 720 y 728nm, y finalmente el tercer rango abarca 808, 840 y 864nm. Esto detalla que la mayoría de longitudes de onda relevantes para cuantificar la proteína se encuentran en la región visible (400 - 780nm), para este parámetro en el rango HSI se obtuvo un R<sup>2</sup>V de 0,71 y RMSEV de 0,202. Zhang *et al.* (2013), encontraron doce longitudes de onda (440, 473, 513, 542, 659, 718, 744, 865, 928, 965, 986 y 1015nm) importantes para estimar los valores de Nitrógeno. Es importante

considerar los valores del Nitrógeno debido a que es el elemento principal para el cálculo de proteína cruda.

En cambio, en la región NIRS las longitudes de onda relevantes para determinar proteína estuvieron dispersas (1343, 1463, 1676, 1837, 1885, 1991, 2148, 2208, 2300, 2337, 2347, 2443, 2452 y 2462nm). Para Diaz *et al.* (2014), las longitudes importantes para determinar proteína son 1654, 1685 y 2055 nm y estas bandas muestran el segundo estiramiento armónico en N-H, combinación C-H / combinación de estiramiento C-O, y estiramiento C-O como las vibraciones de estiramiento N-H (Osborne, 2006). Para Cheng *et al.* (2018), las ondas más relevantes para predecir proteína son 1153, 1567, 1972, 2143, 2288, 2339, 2389 y 2446 nm. Para proteína típicamente se muestran bandas entre 1471–1530 nm, por que corresponde al primer sobretono de estiramiento O-H y N-H (Bagchi *et al.*, 2016); para la presente investigación, las bandas encontradas entre 1837 – 2462nm pueden corresponder a cenizas extracto etéreo, fibras o proteína.

En el presente estudio, las longitudes de onda que mayor información brindaron al modelo fueron 2300, 1676 y 1343nm con valores para  $R^2V$  de 0,771 y RMSEV de 0,007; con estos valores queda demostrado que el rango NIRS tiene mejor capacidad para predecir los niveles de proteína debido a que presenta menor error. Al igual que en humedad, no se descarta que el rango HSI también tenga un gran potencial para predecir el contenido de proteína.

### 4.4. Rango espectral para extracto etéreo

Se conoce que extracto etéreo se refiere a las sustancias que incluyen los ésteres de los ácidos grasos con el glicerol a los fosfolípidos, las lecitinas, los esteroles, las ceras, los ácidos grasos libres, vitaminas liposolubles, los carotenoides, la clorofila y otros pigmentos (AOAC, 1990a). Por lo tanto, hay que considerar que la longitud de onda para los tocoferoles es de 610 nm, y para las clorofilas es 670 nm, que coincide con la absorción de clorofilas. Hay bandas relacionadas con la absorción de agua que existe desde su primer

sobretono C-H a 1400-1500 nm, pero se vinculan también al primer sobretono de varios grupos químicos (CH3, CH2) (Cayuela y García, 2017).

En el modelo de extracto etéreo generado en la región de HSI se seleccionaron 14 longitudes de onda (472, 480, 584, 616, 680, 792, 872, 880, 888, 896, 904, 912, 928 y 936nm) para obtener un  $R^2$  de 0,447 y RMSE de 0,031. Según Lohumi *et al.* (2016), las longitudes de onda que son principales para detectar grasa en carne son 650 y 736 nm en el rango de 400 – 1000nm. En el rango NIRS se seleccionaron las longitudes de onda (1335, 1346, 1409, 1959, 2038, 2053, 2133, 2145, 2282, 2303, 2362, 2371, 2418 y 2431nm) que fueron relevantes para la predicción de extracto etéreo y se obtuvo un  $R^2$  de 0,408 y RMSE de 0,013.

Las bandas de 1726nm y 2310nm están relacionadas por separado con el primer sobretono de C-H, el estiramiento combinado C-H y la banda de deformación de cadenas alifáticas en ácidos grasos (Zhao *et al.*, 2016). Los espectros producidos por el estiramiento de sobretonos C-H, en el rango 1100 – 1400nm explicarían la presencia de ácidos grasos, la selección de longitudes de onda en este rango sería fundamental para predecir estos componentes. En un estudio realizado por Bagchi *et al.* (2016), crearon modelos para predecir aceite en grano de arroz en el rango 400 – 2500nm y encontraron un R<sup>2</sup> de 0,955 y SEP de 0,866. Con estos resultados indicarían que la unión de ambos rangos de estudio sería más factible para el análisis de extracto etéreo debido a que los coeficientes de determinación de manera individual en cada rango solamente son discriminatorios, pero no muy eficientes para predecir.

### 4.5. Rango espectral para fibra cruda

La fibra cruda está compuesta por las paredes celulares, el parénquima, esclerénquima y tejidos de transporte; la FDN contiene hemicelulosa, celulosa, lignina y ceniza insoluble (principalmente sílice), en cambio FDA solo contiene celulosa, lignina y ceniza insoluble (Holtzapple, 2003). En cambio, los carbohidratos no estructurales son los carbohidratos hidrolizables, fructanos, galactanos, fibras solubles y almidón resistente (Wilson, 2012).

Para la fibra cruda se seleccionaron las longitudes de onda entre 480 - 600nm, 658 – 696nm y 760 – 888nm para el rango HSI; y entre 1147, 1336, 1437, 1729 – 1887nm, 2065nm y 2193 – 2440nm en el rango NIRS. Las bandas de absorbancia a 2270 nm se han asignado a grupos de estiramiento O-H más C-C de celulosa, mientras que 1500, 1834, 2078 – 2110, 2268 - 2354 nm se han reportado para determinar fibra bruta (Bala y Singh, 2013). Las longitudes de onda seleccionadas para la determinación de fibras incluyen para celulosa (2044, 2068 y 2206) y lignina (1510, 1944 y 1977) (Diaz *et al.*, 2014). Bagchi *et al.* (2016), mencionan que picos de las longitudes de onda a 1974 – 2490nm podrían corresponder a la banda de absorbancia de las moléculas de fibra. Para el modelo de fibra cruda se obtuvo un valor de R<sup>2</sup>V de 0,67 y RMSEV de 0,437 en el rango HSI y de R<sup>2</sup>V de 0,693 y RMSEV de 0,051 en el rango NIRS.

Con los valores reportados en este trabajo de investigación se puede mencionar que el rango NIRS tiene mejor bondad de ajuste para determinar fibra cruda

#### 4.6. Rango espectral para FDN y FDA

Entre los modelos generados en el rango HSI para FDN se seleccionaron las longitudes de onda relevantes: 400, 480, 536, 560, 576, 584, 600, 608, 616, 720, 744, 784, 840, 920 y 928nm, en cambio para FDA las longitudes de onda relevantes fueron: 400, 496, 544, 552, 560, 616, 624, 632, 640 y 696nm. Las longitudes de onda 400 y 560nm se repiten para ambos modelos FDN y FDA, además en este rango se obtuvieron los mejores coeficientes de predicción (R<sup>2</sup>V: 0,766, RMSEV: 0,201; R<sup>2</sup>V: 0,892, RMSEV: 0,355 respectivamente), esto demostraría que las bandas de la región visible son buenas para determinar componentes estructurales como lignina, hemicelulosa y lignina (componentes principales de FDN y FDA respectivamente).

Sin embargo, los modelos generados en el rango NIRS para FDN las longitudes de onda más relevantes fueron: 1335, 1345, 1373, 1684, 1723, 1782, 1879, 2006, 2223, 2257, 2295, 2306, 2333, 2394, 2464 y 2495nm; y

para FDA las longitudes de onda fueron: 1374, 1725, 1899, 1932, 2027, 2083, 2093, 2157, 2239, 2274, 2311, 2361, 2415 y 2424nm. En comparación con los componentes de FDN y FDA Jin *et al.* (2017), mostraron 23 longitudes de onda para caracterizar hemicelulosa, siendo 426, 482, 534, 584, 666, 686, 1096, 1230, 1316, 1370, 1440, 1516, 1564, 1586, 1732, 1890, 1982, 2048, 2214, 2268, 2312, 2378 y 2442nm y 12 longitudes de onda relevantes para determinar celulosa (480, 596, 632, 1100, 1404, 1506, 1586, 1898, 1998, 2210, 2362 y 2492 nm), y para lignina reportaron una alta correlación con 438, 576, 682, 852, 1192, 1194, 1368, 1518, 1670, 1940, 2142 y 2264 nm.

En el rango NIRS, para el modelo de FDN se obtuvieron valores para  $R^2V$  de 0,754 y para RMSEV de 0,305. y para el modelo de FDA se obtuvieron valores para  $R^2V$  de 0,829 y para RMSEV de 0,152. Con estos valores se puede concluir que ambos rangos son buenos para determinar FDN y FDA como se observa en las Figura 15 y 7.

# 4.7. Rango espectral para extracto libre de nitrógeno

Para el modelo de los carbohidratos no estructurales (ELN) en el rango HSI, las longitudes de onda relevantes fueron: 504, 528, 544, 560, 576, 600, 632, 656, 664, 680, 696, 728, 744, 768, 792, 824, 840 y 888nm; para este modelo se muestra un RMSE de 1,039 en este rango (ver Figura 16), por lo que podría no ser viable utilizar el modelo de ELN en este rango espectral.

Para el rango NIRS el modelo ELN seleccionó las bandas relevantes de: 1336, 1437, 1731, 1765, 1819, 1830, 1875, 1889, 2022, 2065, 2233, 2257, 2283, 2302, 2335, 2361, 2377 y 2440nm, y se obtuvo un R<sup>2</sup>V de 0,748 y RMSEV de 0,022. Las bandas 2107, 2318, 2350, y 1771nm están relacionados con los carbohidratos libres (Ercioglu *et al.*, 2018). La banda de absorción a 1120 – 1225 nm está relacionada con un segundo sobretono de C-H, y la combinación corresponde a amilosa (Ma *et al.*, 2017). Las bandas 1929nm y 1463nm están relacionadas a los sobretonos O-H relacionados a amilosa (Sampaio *et al.*, 2018). Para Rady *et al.* (2014), el rango 446 – 1125nm arroja buenos índices de correlación para glucosa, sacarosa y solidos solubles. Sin embargo, Santos *et al.* (2016), estudiaron el rango 1000 – 2500nm para

determinar la concentración de sacarosa con modelos PLSR y obtuvieron valores de R<sup>2</sup>P de 0,929 y un error cuadrático medio de predicción (RMSEP) de 0,73; demostrando que la región NIRS es una buena alternativa para predecir carbohidratos no estructurales o extracto libre de nitrógeno.

#### 4.8. Rango espectral para cenizas y energía

Los modelos que presentan un mejor ajuste para cenizas y energía (valor energético bruto) (ver figuras 6 y7), se obtuvieron en el rango NIRS. Para el modelo de cenizas se seleccionaron las longitudes de onda 1160, 1335, 1721, 1745, 1910, 2094, 2138, 2156, 2214, 2218, 2276, 2291, 2316, 2375, 2424, 2462, 2473 y 2491nm; en cambio para el modelo de energía se seleccionaron las bandas espectrales 1345, 1399, 1901, 1931, 1984, 2034, 2245, 2268, 2301, 2334, 2411, 2423, 2474 y 2489nm. Según Mancini *et al.* (2018), el rango 2223 – 2227nm y 2032 – 20140nm son bandas relacionadas al enlace C – H que se vincula a la modelación para energía, sin embargo la banda 1312 – 1322nm está relacionada a la primera combinación armónica para C-H y está vinculada a la modelación para cenizas. Pojić *et al.* (2010), mencionan que en el rango 400 – 2500nm sirve para predecir el contenido de cenizas de legumbres con valores para R<sup>2</sup> de 0,89 y para el error estándar de validación cruzada (SECV) es < 0,60, y mencionan el alto potencial para determinar cenizas en este rango.

La bondad de ajuste para el modelo de energía muestra que es discriminante en el rango NIRS, al igual que los valores obtenidos en el modelo para cenizas; en los cuales sería más factible realizar modelos con un mayor número de muestras para dichos parámetros.

# V. CONCLUSIONES

- Se obtuvo los perfiles espectrales de intensidad de los rangos [400 1000]nm y [1100 – 2500]nm, para generar los modelos y predecir los valores bromatológicos de la cáscara de café.
- Se generó los modelos de predicción en el rango HSI y NIRS para las propiedades de humedad, proteína, extracto etéreo, fibra cruda, cenizas, extracto libre de nitrógeno (ELN), fibra detergente neutra (FDN), fibra detergente acida (FDA), y energía de la cáscara de café.
- El rango NIRS tiene mejores resultados para predecir el porcentaje de humedad, proteína, fibra cruda, cenizas, extracto libre de nitrógeno y energía. Sin embargo, el rango HSI tiene una mejor capacidad de predecir los parámetros de FDN y FDA, aunque también resulta ser un buen rango para predecir humedad, proteína y fibra cruda.

## VI. RECOMENDACIONES

- El número de muestras analizadas para generar los modelos en este estudio han sido significativas para reportar una tendencia de predicción y evaluar la factibilidad de la aplicación en cada parámetro y en cada rango estudiado, pero no se pueden utilizar para análisis de rutina. Para generar modelos de uso constante en la predicción de los parámetros reportados en este estudio es conveniente trabajar con una mayor cantidad de muestras.
- En el presente estudio, los muestreos se realizaron en dos lugares geográficamente distintos, considerando tres variedades y tres periodos post-procesado. Los modelos generados pueden no ser viables para compararlos con cáscara de café proveniente de otro lugar u otra variedad no descrita en este trabajo.
- Es factible el uso de ambos rangos de manera independiente para predecir la composición bromatológica de la cáscara de café deshidratada, teniendo en cuenta que cada uno tiene virtudes en la caracterización para distintos parámetros.

# VII. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AOAC. (1990a). Fat (crude) or Ether Extract in Animal Feed. AOAC Method 920.39. En Official Methods of Analysis of AOAC International (15.ª ed., p. 79). Arungton, Virginia 22201, USA.
- AOAC. (1990b). Fiber (crude) in animal feed. AOCS-AOAC Method 962.09. En Official Methods of Analysis of AOAC International (15.<sup>a</sup> ed., p. 80). Arungton, Virginia 22201, USA.
- AOAC. (1996). Moisture in Animal Feed, Method 930.15. En Official Methods of Analysis of AOAC International (16.<sup>a</sup> ed.). Gaithersburg.
- AOAC. (2000). Ash of Animal Feed. AOAC Official Methods 942.05. *Journal of AOAC International*, 857(1942), 2000.
- AOAC. (2006a). Official methods of analysis Acid Detergent Fiber (ADF) Calculation:
  ADF = cellulose plus lignin item 89. En Association of Analytical Communities (17.<sup>a</sup> ed.). Gaithersburg, MD.
- AOAC. (2006b). Official methods of analysis Available Carbohydrates Calculation: 100 percent minus percent (CP + Ash + Crude Fat + M + Crude Fiber) item 86. En Association of Analytical Communities (17.<sup>a</sup> ed.). Gaithersburg, MD.
- AOAC. (2006c). Official methods of analysis Neutral Detergent Fiber (NDF)
  Calculation: NDF = cellulose + lignin + hemicellulose item 90. En Association of
  Analytical Communities (17.<sup>a</sup> ed.). Gaithersburg, MD.
- AOAC. (2012). Método 928.08 «Kjeldahl method». En G. W. Latimer (Ed.), Official Methods of Analysis of AOAC International (19.ª ed., p. 5, (39.1.15)). Arungton, Virginia 22201, USA.
- Bagchi, T. B., Sharma, S., y Chattopadhyay, K. (2016). Development of NIRS models to predict protein and amylose content of brown rice and proximate compositions of rice bran. *Food Chemistry*, 191, 21-27.
- Bala, M., y Singh, M. (2013). Non destructive estimation of total phenol and crude fiber content in intact seeds of rapeseed-mustard using FTNIR. *Industrial Crops and Products*, 42(1), 357-362.
- Barbin, D. F., Elmasry, G., Sun, D. W., y Allen, P. (2013). Non-destructive determination of chemical composition in intact and minced pork using near-infrared hyperspectral imaging. *Food Chemistry*, 138(2-3), 1162-1171.
- Bosoon, P., y Renfu, L. (2015). *Hyperspectral Imaging Technology in Food and Agriculture*. Springer.

- Casal, C. (2013). Implantación de la tecnología NIRS en aplicaciones in-situ como herramienta de apoyo a las decisiones en el sector primario. Universidad de Oviedo.
- Castillo, E., Acosta, Y., Betancourt, N. N., Castellanos, L. E., Matos, A. M., Cobos, V., y Jover, M. (2002). Utilización de la pulpa de café en la alimentacion de alevines de tilapia roja. *AquaTIC*, 16.
- Castro, W. M. (2010). Aplicacion de la tecnologia de imagenes hiperespectrales al control de calidad de productos agroalimentarios de la región amazonas (Perú). Tesis Doctoral.
- Castro silupu, W. M., Yoplac Tafur, I. J., y López Portocarrero, C. A. (2015). Predicción del color y contenido de humedad en café cerezo mediante redes neuronales y regresión de mínimos cuadrados parciales. *Ciencia amazónica*, 5(2), 91-103.
- Cayuela, J. A., y García, J. F. (2017). Sorting olive oil based on alpha-tocopherol and total tocopherol content using near-infra-red spectroscopy (NIRS) analysis. *Journal* of Food Engineering, 202, 79-88.
- Cheng, J. H., Jin, H., y Liu, Z. (2018). Developing a NIR multispectral imaging for prediction and visualization of peanut protein content using variable selection algorithms. *Infrared Physics and Technology*, 88, 92-96.
- Diaz, J. T., Veal, M. W., y Chinn, M. S. (2014). Development of NIRS models to predict composition of enzymatically processed sweetpotato. *Industrial Crops and Products*, 59, 119-124.
- Elías, L. G. (1978). Composición química de la pulpa de café y otros subproductos. Pulpa de café. Composición, tecnología y utilización.
- Ercioglu, E., Velioglu, H. M., y Boyaci, I. H. (2018). Determination of terpenoid contents of aromatic plants using NIRS. *Talanta*, *178*(October 2017), 716-721.
- Feng, Y. Z., Elmasry, G., Sun, D. W., Scannell, A. G. M., Walsh, D., y Morcy, N. (2013). Near-infrared hyperspectral imaging and partial least squares regression for rapid and reagentless determination of Enterobacteriaceae on chicken fillets. *Food Chemistry*, 138(2-3), 1829-1836.
- Geladi, P. (2003). Chemometrics in spectroscopy. Part 1. Classical chemometrics. Spectrochimica Acta - Part B Atomic Spectroscopy, 58(5), 767-782.
- Gobrecht, A., Bendoula, R., Roger, J. M., y Bellon-Maurel, V. (2015). Combining linear polarization spectroscopy and the Representative Layer Theory to measure the Beer-Lambert law absorbance of highly scattering materials. *Analytica Chimica Acta*, 853(1), 486-494.

- Heman, A., y Hsieh, C.-L. (2016). Measurement of moisture content for rough rice by visible and near-infrared (NIR) spectroscopy. *Engineering in Agriculture*, *Environment and Food*, 9(3), 280-290.
- Holtzapple, M. T. (2003). HEMICELLULOSES. En *Enciclopedia de Ciencias de la Alimentación y Nutrición* (2.ª ed., pp. 3060-3071). Oxford: Academic Press.
- Huang, H., Liu, L., y Ngadi, M. (2014). Recent Developments in Hyperspectral Imaging for Assessment of Food Quality and Safety. *Sensors*, *14*(4), 7248-7276.
- Jin, X., Chen, X., Shi, C., Li, M., Guan, Y., Yu, C. Y., ... Peng, J. (2017). Determination of hemicellulose, cellulose and lignin content using visible and near infrared spectroscopy in Miscanthus sinensis. *Bioresource Technology*, 241, 603-609.
- Lohumi, S., Lee, S., Kim, M. S., Lee, W., y Cho, B. (2016). Application of hyperspectral imaging for characterization of intramuscular fat distribution in beef. *Infrared Physics and Technology*, 74, 1-10.
- López, A., Arazuri, S., Jarén, C., Mangado, J., Arnal, P., Galarreta, J. I. R. De, ... López, R. (2013). Crude Protein Content Determination of Potatoes by NIRS Technology. *Procedia Technology*, 8(Haicta), 488-492.
- Ma, H. liang, Wang, J. wen, Chen, Y. jun, Cheng, J. le, y Lai, Z. tian. (2017). Rapid authentication of starch adulterations in ultrafine granular powder of Shanyao by near-infrared spectroscopy coupled with chemometric methods. *Food Chemistry*, 215, 108-115.
- Mancini, M., Rinnan, Pizzi, A., y Toscano, G. (2018). Prediction of gross calorific value and ash content of woodchip samples by means of FT-NIR spectroscopy. *Fuel Processing Technology*, 169(May 2017), 77-83.
- Martens, H., y Martens, M. (2001). Multivariate Analysis of Quality. An Introduction. *Measurement Science and Technology*, 12(10), 445.
- Murthy, P. S., y Madhava Naidu, M. (2012). Sustainable management of coffee industry by-products and value addition - A review. *Resources, Conservation and Recycling*, 66, 45-58.
- Núñez-Sánchez, N., Martínez Marín, A. L., Hernández, M. P., Carrion, D., Castro, G. G., y Pérez Alba, L. M. (2012). Faecal near infrared spectroscopy (NIRS) as a tool to asses rabbit's feed digestibility. *Livestock Science*, 150(1–3), 386-390.
- Oliveira, E., y Santos, H. M. (2016). An overview on sensing materials depending on the electromagnetic spectra region applied. *Dyes and Pigments*, *135*, 3-25.
- Osborne, B. G. (2006). Near-Infrared Spectroscopy in Food Analysis. En Encyclopedia

of Analytical Chemistry. North Ryde, Australia: BRI Australia Ltd.

- Pandey, A., Soccol, C. R., Nigam, P., Brand, D., Mohan, R., y Roussos, S. (2000). Biotechnological potential of coffee pulp and coffee husk for bioprocesses. *Biochemical Engineering Journal*, 6(2), 153-162.
- Pojić, M., Mastilović, J., Palić, D., y Pestorić, M. (2010). The development of nearinfrared spectroscopy (NIRS) calibration for prediction of ash content in legumes on the basis of two different reference methods. *Food Chemistry*, 123(3), 800-805.
- Rady, A. M., Guyer, D. E., Kirk, W., y Donis-González, I. R. (2014). The potential use of visible/near infrared spectroscopy and hyperspectral imaging to predict processing-related constituents of potatoes. *Journal of Food Engineering*, 135, 11-25.
- Ravikanth, L., Singh, C. B., Jayas, D. S., y White, N. D. G. (2015). Classification of contaminants from wheat using near-infrared hyperspectral imaging. *Biosystems Engineering*, 135, 73-86.
- Sampaio, P. S., Soares, A., Castanho, A., Almeida, A. S., Oliveira, J., y Brites, C. (2018). Optimization of rice amylose determination by NIR-spectroscopy using PLS chemometrics algorithms. *Food Chemistry*, 242(August 2017), 196-204.
- Santos, J. R., Viegas, O., Páscoa, R. N. M. J., Ferreira, I. M. P. L. V. O., Rangel, A. O. S. S., y Lopes, J. A. (2016). In-line monitoring of the coffee roasting process with near infrared spectroscopy: Measurement of sucrose and colour. *Food Chemistry*, 208, 103-110.
- Scholz, M. B. S., Pagiatto, N. F., Kitzberger, C. S. G., Pereira, L. F. P., Davrieux, F., Charmetant, P., y Leroy, T. (2014). Validation of near-infrared spectroscopy for the quantification of cafestol and kahweol in green coffee. *Food Research International*, *61*, 176-182.
- Thiex, N. J., Anderson, S., y Gildemeister, B. (2003). Crude fat, diethyl ether extraction, in feed, cereal grain, and forage (Randall/Soxtec/Submersion method): Collaborative study. *Journal of AOAC International*, 86(5), 888-898.
- Thiex, N., Novotny, L., y Crawford, A. (2012). Determination of ash in animal feed: AOAC official method 942.05 revisited. *Journal of AOAC International*, 95(5), 1392-1397.
- Ulloa, J. B., Verreth, J. A. J., Amato, S., y Huisman, E. A. (2003). Biological treatments affect the chemical composition of coffee pulp. *Bioresource Technology*, 89(3), 267-274.

- Unity Scientific. (2014). The Pursuit of the Perfect NIR Measurement. InfoStar, SpectraStar XL and UCal are all trademarks of Westco Scientific Instruments, 1-6.
- Van Soest, P. J., Robertson, J. B., y Lewis, B. A. (1991). Methods for Dietary Fiber, Neutral Detergent Fiber, and Nonstarch Polysaccharides in Relation to Animal Nutrition. *Journal of Dairy Science*, 74(10), 3583-3597.
- Vásquez, N., Magán, C., Oblitas, J., Chuquizuta, T., Avila-George, H., y Castro, W. (2018). Comparison between artificial neural network and partial least squares regression models for hardness modeling during the ripening process of Swiss-type cheese using spectral profiles. *Journal of Food Engineering*, 219, 8-15.
- Wang, J. X., Fan, L. F., Wang, H. H., Zhao, P. F., Li, H., Wang, Z. Y., y Huang, L. (2017). Determination of the moisture content of fresh meat using visible and near-infrared spatially resolved reflectance spectroscopy. *Biosystems Engineering*, 162, 40-56.
- Wilson, D. (2012). Nutrition: Carbohydrates. En *Clinical Veterinary Advisor* (pp. 779-780). Saint Louis: W.B. Saunders.
- Wu, D., y Sun, D.-W. (2013). Advanced applications of hyperspectral imaging technology for food quality and safety analysis and assessment: A review Part II: Applications. *Innovative Food Science y Emerging Technologies*, 19, 15-28.
- Xu, J.-L., Riccioli, C., y Sun, D.-W. (2016). Development of an alternative technique for rapid and accurate determination of fish caloric density based on hyperspectral imaging. *Journal of Food Engineering*, 190, 185-194.
- Xuemei, L., y Jianshe, L. (2013). Measurement of soil properties using visible and short wave-near infrared spectroscopy and multivariate calibration. *Measurement*, 46(10), 3808-3814.
- Zhang, X., Liu, F., He, Y., y Gong, X. (2013). Detecting macronutrients content and distribution in oilseed rape leaves based on hyperspectral imaging. *Biosystems Engineering*, 115(1), 56-65.
- Zhao, M., Downey, G., y O'Donnell, C. P. (2016). Exploration of microwave dielectric and near infrared spectroscopy with multivariate data analysis for fat content determination in ground beef. *Food Control*, 68, 260-270.
- Zhao, M., Esquerre, C., Downey, G., y O'Donnell, C. P. (2017). Process analytical technologies for fat and moisture determination in ground beef - a comparison of guided microwave spectroscopy and near infrared hyperspectral imaging. *Food Control*, 73, 1082-1094.

ANEXOS



Figura 17. Número de longitudes de onda (variables latentes) seleccionadas para humedad.



Figura 18. Número de longitudes de onda (variables latentes) seleccionadas para proteína.



Figura 19. Número de longitudes de onda (variables latentes) seleccionadas para extracto etéreo.



Figura 20. Número de longitudes de onda (variables latentes) seleccionadas para fibra cruda.



Figura 21. Número de longitudes de onda (variables latentes) seleccionadas para cenizas.



Figura 22. Número de longitudes de onda (variables latentes) seleccionadas para extracto libre de nitrógeno (ELN).



Figura 23. Número de longitudes de onda (variables latentes) seleccionadas para fibra detergente neutra (FDN).



Figura 24. Número de longitudes de onda (variables latentes) seleccionadas para fibra detergente ácida (FDA).



Figura 25. Número de longitudes de onda (variables latentes) seleccionadas para energía.



Figura 26. Comparación entre valores reales y predichos para humedad en el rango HSI.



Figura 27. Comparación entre valores reales y predichos para humedad en el rango NIRS.



Figura 28. Comparación entre valores reales y predichos para proteína en el rango HSI.



Figura 29. Comparación entre valores reales y predichos para proteína en el rango NIRS.



Figura 30. Comparación entre valores reales y predichos para extracto etéreo en el rango HSI.



Figura 31. Comparación entre valores reales y predichos para extracto etéreo en el rango NIRS.

![](_page_70_Figure_0.jpeg)

Figura 32. Comparación entre valores reales y predichos para fibra cruda en el rango HSI.

![](_page_70_Figure_2.jpeg)

Figura 33. Comparación entre valores reales y predichos para fibra cruda en el rango NIRS.

![](_page_71_Figure_0.jpeg)

Figura 34. Comparación entre valores reales y predichos para cenizas en el rango HSI.

![](_page_71_Figure_2.jpeg)

Figura 35. Comparación entre valores reales y predichos para cenizas en el rango NIRS.


Figura 36. Comparación entre valores reales y predichos para ELN en el rango HSI.



Figura 37. Comparación entre valores reales y predichos para ELN en el rango NIRS.



Figura 38. Comparación entre valores reales y predichos para FDN en el rango HSI.



Figura 39. Comparación entre valores reales y predichos para FDN en el rango NIRS.



Figura 40. Comparación entre valores reales y predichos para FDA en el rango HSI.



Figura 41. Comparación entre valores reales y predichos para FDA en el rango NIRS.



Figura 42. Comparación entre valores reales y predichos para energía en el rango HSI.



Figura 43. Comparación entre valores reales y predichos para energía en el rango NIRS.



Figura 44. Planta de *Coffea arabica* variedad Típica, Lonya Grande-Utcubamba.



Figura 45. Cosecha de *Coffea arabica* variedad típica, Omia -Rodríguez de Mendoza.



Figura 46. Recolección de muestras de cáscara de café. Caserío Nueva York, Lonya Grande-Utcubamba.



Figura 47. Despulpado de *Coffea arabica* variedad caturra. Omia - Rodríguez de Mendoza.



Figura 48. Molino ultracentrífugo (RETSCH ZM200) utilizado para moler las muestras de cáscara de café. Laboratorio de suelos y aguas.



Figura 49. Muestra molida de cáscara de café.



Figura 50. Almacenamiento de muestras de cáscara de café a temperatura ambiente.



Figura 51. Captura de Imágenes Hiperespectrales.



Figura 52. Reporte de medición de energía de la bomba calorimétrica.



Figura 53. Cápsula para colocar las muestras en el equipo NIRS. a. Cápsula con la cubierta; b. Capsula con la muestra de cáscara de café (zona de la incidencia de la luz infrarroja).



Figura 54. Captura de perfiles espectrales NIR.

| - E 5 · ♂ · ∓ |        |        |           |       |                  |           |        |        |               |         |            | Espectros_HSI_NIR - Excel |         |           |       |          |  |       |               | Wuesley Y. Alvarez Garcia |   |         |                                  |              | ×  |
|---------------|--------|--------|-----------|-------|------------------|-----------|--------|--------|---------------|---------|------------|---------------------------|---------|-----------|-------|----------|--|-------|---------------|---------------------------|---|---------|----------------------------------|--------------|----|
| Arc           | hivo   | Inicio | Ins       | ertar | Diseño           | de página | Fórm   | ulas D | atos R        | Revisar | Vista      | Complem                   | entos   | Nitro Pro | ₽ įC  |          |  |       |               |                           |   |         | 18                               | 2 Comparti   |    |
| Pegar         |        |        | Calibri • |       |                  | A A       | === ** |        | Ajustar texto |         | centrar ~  | General                   | General |           | →     |          | Dar formato Estilos de<br>como tabla - celda - |       | Eliminar Form | ato ₹                     | Autosuma * A<br>Rellenar * Z<br>Borrar * Orde |         | nary Buscary<br>ar seleccionar * |              |    |
| Porta         | papele | s Fa   |           | Fuer  | nte              | G.        |        | A      | lineación     |         |            | N                         | úmero   |           |       | Estilos  |  |       | Celdas        |                           |   | Edición |                                  |              | ^  |
| A2            |        | Ŧ      |           | ×     | 🗸 f <sub>x</sub> | 1         |        |        |               |         |            |                           |         |           |       |          |  |       |               |                           |   |         |                                  |              | ۷  |
| - 4           | A      | в      | С         | D     | E                | BT        | BU     | B¥     | BV            | BX      | BY         | BZ                        | CA      | CB        | CC    | CD       | CE   | CF    | CG            | СН                        | CI  | CJ      | СК                               | CL           |    |
|               | Varied | Lug    | Periodo   | Rep.  | Rep.             | 928       | 936    | 944    | 952           | 960     | 968        | 976                       | 984     | 992       | 1000  | Moisture | Protein<br>(%)                                 | Ether | Crude Fiber   | Ash (%)                   | NFE (%)                                       | NDF (%) | ADF (%)                          | ergia (Mcal/ | ıП |
| 2             | 1      | 11     | 1         | 1     | 1                | 12141     | 12312  | 12455  | 12579         | 12818   | 12891      | 13148                     | 13362   | 13591     | 13772 | 8.65     | 11.56  | 1.969 | 28.71         | 6.81                      | 42.30   | 60.74   | 49.20                            | 4.45         | 11 |
| 3             | 1      | 1      | 1         | 1     | 2                | 12079     | 12226  | 12376  | 12517         | 12694   | 12849      | 13063                     | 13275   | 13546     | 13661 | 8.65     | 11.56  | 1.969 | 28.71         | 6.81                      | 42.30   | 60.74   | 49.20                            | 4.45         | 1  |
| - 4           | 1      | 1      | 1         | 1     | 3                | 12008     | 12183  | 12345  | 12465         | 12686   | 12769      | 13022                     | 13258   | 13483     | 13668 | 8.65     | 11.56  | 1.969 | 28.71         | 6.81                      | 42.30   | 60.74   | 49.20                            | 4.45         |    |
| 5             | 1      | 1      | 1         | 1     | 4                | 12013     | 12144  | 12307  | 12450         | 12625   | 12793      | 12997                     | 13234   | 13485     | 13612 | 8.65     | 11.56  | 1.969 | 28.71         | 6.81                      | 42.30   | 60.74   | 49.20                            | 4.45         |    |
| 6             | 1      | 1      | 1         | 1     | 5                | 11985     | 12153  | 12290  | 12443         | 12656   | 12748      | 13016                     | 13226   | 13465     | 13672 | 8.65     | 11.56  | 1.969 | 28.71         | 6.81                      | 42.30   | 60.74   | 49.20                            | 4.45         |    |
| 0             | 1      | 1      | 1         | 2     | 2                | 12077     | 12233  | 12388  | 12527         | 12730   | 12863      | 13082                     | 13311   | 13585     | 13761 | 8.53     | 11.33  | 2.079 | 25.39         | 6.94                      | 45.12   | 60.84   | 51.02                            | 4.33         |    |
| 9             | 1      | 1      | 1         | 2     | 3                | 12002     | 12117  | 12306  | 12432         | 12625   | 12762      | 12965                     | 13231   | 13482     | 13613 | 8.53     | 11.33  | 2.079 | 25.34         | 6.94                      | 45.12   | 60.84   | 51.02                            | 4.33         |    |
| 10            | 1      | 1      | 1         | 2     | 4                | 12003     | 12160  | 12314  | 12450         | 12673   | 12804      | 13037                     | 13263   | 13524     | 13732 | 8.53     | 11.99  | 2.079 | 25.34         | 6.94                      | 45.12   | 60.84   | 51.02                            | 4.33         |    |
| 11            | 1      | 1      | 1         | 2     | 5                | 12003     | 12160  | 12314  | 12450         | 12673   | 12804      | 13037                     | 13263   | 13524     | 13732 | 8.53     | 11.99  | 2.079 | 25.34         | 6.94                      | 45.12   | 60.84   | 51.02                            | 4.33         |    |
| 12            | 1      | 1      | 1         | 3     | 1                | 12207     | 12355  | 12533  | 12632         | 12867   | 13007      | 13217                     | 13488   | 13696     | 13911 | 9.21     | 11.80  | 1.843 | 25.90         | 6.89                      | 44.36   | 59.34   | 50.40                            | 4.54         |    |
| 13            | 1      | 1      | 1         | 3     | 2                | 12210     | 12379  | 12542  | 12659         | 12901   | 12993      | 13266                     | 13506   | 13740     | 13936 | 9.21     | 11.80  | 1.843 | 25.90         | 6.89                      | 44.36   | 59.34   | 50.40                            | 4.54         |    |
| 14            | 1      | 1      | 1         | 3     | 3                | 12196     | 12342  | 12494  | 12639         | 12831   | 12976      | 13219                     | 13444   | 13720     | 13879 | 9.21     | 11.80  | 1.843 | 25.90         | 6.89                      | 44.36   | 59.34   | 50.40                            | 4.54         |    |
| 15            | 1      | 1      | 1         | 3     | 4                | 12191     | 12344  | 12525  | 12615         | 12873   | 12988      | 13223                     | 13506   | 13715     | 13930 | 9.21     | 11.80  | 1.843 | 25.90         | 6.89                      | 44.36   | 59.34   | 50.40                            | 4.54         |    |
| 16            | 1      | 1      | 1         | 3     | 5                | 12111     | 12261  | 12419  | 12564         | 12767   | 12901      | 13164                     | 13383   | 13653     | 13801 | 9.21     | 11.80  | 1.843 | 25.90         | 6.89                      | 44.36   | 59.34   | 50.40                            | 4.54         |    |
| 1/            | 1      | 1      | 2         | 1     | 2                | 11221     | 11346  | 11531  | 11637         | 11072   | 12065      | 12267                     | 12931   | 12701     | 12000 | 0.20     | 12.23  | 1979  | 22.71         | 7.60                      | 47.24   | 53.85   | 53.34                            | 4.23         |    |
| 19            | 1      | 1      | 2         | 1     | 3                | 11149     | 11317  | 11501  | 11608         | 11858   | 11972      | 12207                     | 12475   | 12666     | 12884 | 8.26     | 12.23  | 1879  | 22.71         | 7.68                      | 47.24   | 59.85   | 53.34                            | 4.23         |    |
| 20            | 1      | 1      | 2         | 1     | 4                | 11149     | 11317  | 11501  | 11608         | 11858   | 11972      | 12207                     | 12475   | 12666     | 12884 | 8.26     | 12.23  | 1879  | 22.71         | 7.68                      | 47.24   | 59.85   | 53.34                            | 4.23         |    |
| 21            | 1      | i      | 2         | 1     | 5                | 11121     | 11302  | 11458  | 11601         | 11830   | 11941      | 12196                     | 12432   | 12678     | 12868 | 8.26     | 12.23  | 1.879 | 22.71         | 7.68                      | 47.24   | 59.85   | 53.34                            | 4.23         |    |
| 22            | 1      | 1      | 2         | 2     | 1                | 10870     | 11007  | 11187  | 11319         | 11492   | 11649      | 11825                     | 12046   | 12265     | 12377 | 8.04     | 13.77  | 1.676 | 21.81         | 7.76                      | 46.94   | 58.90   | 54.71                            | 4.82         | 1  |
| 23            | 1      | 1      | 2         | 2     | 2                | 10804     | 10971  | 11109  | 11250         | 11459   | 11578      | 11809                     | 11977   | 12221     | 12376 | 8.04     | 13.77  | 1.676 | 21.81         | 7.76                      | 46.94   | 58.90   | 54.71                            | 4.82         | 1  |
| 24            | 1      | 1      | 2         | 2     | 3                | 10776     | 10934  | 11068  | 11217         | 11422   | 11556      | 11769                     | 11932   | 12172     | 12327 | 8.04     | 13.77  | 1.676 | 21.81         | 7.76                      | 46.94   | 58.90   | 54.71                            | 4.82         |    |
| 25            | 1      | 1      | 2         | 2     | 4                | 10714     | 10880  | 11067  | 11186         | 11403   | 11484      | 11720                     | 11943   | 12136     | 12295 | 8.04     | 13.77  | 1.676 | 21.81         | 7.76                      | 46.94   | 58.90   | 54.71                            | 4.82         |    |
| 26            | 1      | 1      | 2         | 2     | 5                | 10719     | 10861  | 11033  | 11173         | 11382   | 11502      | 11715                     | 11915   | 12149     | 12306 | 8.04     | 13.77  | 1.676 | 21.81         | 7.76                      | 46.94   | 58.90   | 54.71                            | 4.82         |    |
| 27            | 1      | 1      | 2         | 3     | 1                | 11085     | 11230  | 11428  | 11543         | 11733   | 11880      | 12087                     | 12301   | 12535     | 12660 | 7.90     | 12.92  | 1.746 | 20.93         | 8.29                      | 48.21   | 59.45   | 53.76                            | 4.82         |    |
| 28            | 1      | 1      | 2         | 3     | 2                | 11049     | 11181  | 11372  | 11478         | 11711   | 11843      | 12011                     | 12267   | 12478     | 12642 | 7.90     | 12.92  | 1.746 | 20.93         | 8.29                      | 48.21   | 59.45   | 53.76                            | 4.82         | -  |
| 29            | -      | 1      | 2         | 3     | 3                | 10930     | 11062  | 11255  | 11370         | 11590   | 11740      | 11900                     | 12172   | 12369     | 12548 | 7.90     | 12.92  | 1.746 | 20.93         | 8.29                      | 46.21   | 59.45   | 53.76                            | 4.82         | -  |
| 30            | 1      | 1      | 2         | 3     | - 4              | 10330     | 11052  | 11235  | 11375         | 11594   | 11754      | 11931                     | 12200   | 12415     | 12575 | 7.90     | 12.92  | 1746  | 20.93         | 8.29                      | 48.21   | 59.45   | 53.76                            | 4.02         |    |
| 32            | 1      | 1      | - 3       | 1     | 1                | 11899     | 12058  | 12309  | 12452         | 12750   | 12958      | 13232                     | 13622   | 13922     | 14213 | 7.78     | 12.32  | 1736  | 23.71         | 7.89                      | 46.63   | 60.44   | 53.48                            | 4.33         |    |
| vh            |        | 1      | 0.00      |       | L NUC            |           |        |        |               |         |            |                           | IUDEE   |           |       |          | nu. to of                                      |       | and IT        |                           | 10.00   | 50.44   |                                  |              |    |
|               |        |        |           |       |                  |           |        |        |               |         | <b>—</b> – |                           | + 70    |           |       |          |  |       |               |                           |   |         |                                  |              |    |

Figura 55. Tabla de perfiles espectrales en Excel.



Figura 56. Modelación y validación en Matlab 2015<sup>a</sup>.