

**UNIVERSIDAD NACIONAL
TORIBIO RODRÍGUEZ DE MENDOZA DE AMAZONAS**



**FACULTAD DE INGENIERÍA Y CIENCIAS AGRARIAS
ESCUELA PROFESIONAL DE INGENIERÍA AGROINDUSTRIAL**

**TESIS PARA OBTENER
EL TÍTULO PROFESIONAL DE
INGENIERA AGROINDUSTRIAL**

**CARACTERIZACIÓN QUÍMICA DE GUANÁBANA,
CHIRIMOYA Y PIÑA USANDO MICROSCOPIA
CONFOCAL RAMAN Y QUIMIOMETRÍA**

Autora:

Bach. Geidy Salon Llanos

Asesor:

Dr. Efraín Manuelito Castro Alayo

Coasesores:

Ms. César Rafael Balcázar Zumaeta

Ing. Llisela Torrejon Valqui

Registro: (.....)

CHACHAPOYAS – PERÚ

2023

AUTORIZACIÓN DE PUBLICACIÓN DE TESIS EN EL REPOSITORIO INSTITUCIONAL DE LA UNTRM



ANEXO 3-H

AUTORIZACIÓN DE PUBLICACIÓN DE LA TESIS EN EL REPOSITORIO INSTITUCIONAL DE LA UNTRM

1. Datos de autor 1

Apellidos y nombres (tener en cuenta las tildes): Salon Llanos Geidy
DNI N°: 61751875
Correo electrónico: 6175187552@untrm.edu.pe
Facultad: Ingeniería y Ciencias Agrarias
Escuela Profesional: Ingeniería Agroindustrial

Datos de autor 2

Apellidos y nombres (tener en cuenta las tildes): _____
DNI N°: _____
Correo electrónico: _____
Facultad: _____
Escuela Profesional: _____

2. Título de la tesis para obtener el Título Profesional

Caracterización Química de Guanábana, Chirimoya y Piña usando Microscopia Confocal Raman y Quimiometría.

3. Datos de asesor 1

Apellidos y nombres: Castro Alayo Efraín Manuelito
DNI, Pasaporte, C.E N°: 18204816
Open Research and Contributor-ORCID (<https://orcid.org/0000-0002-9670-0970>) 0000-0003-4322-8980

Datos de asesor 2

Apellidos y nombres: Balcázar Zumaeta César Rafael
DNI, Pasaporte, C.E N°: 46734552
Open Research and Contributor-ORCID (<https://orcid.org/0000-0002-9670-0970>) 0000-0002-3033-6440

4. Campo del conocimiento según la Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económicos- OCDE (ejemplo: Ciencias médicas, Ciencias de la Salud-Medicina básica-Inmunología)

https://catalogos.concytec.gob.pe/vocabulario/ocde_ford.html
2.00.00 Ingeniería y tecnología 1.00.00 Ciencias naturales

5. Originalidad del Trabajo

Con la presentación de esta ficha, el(la) autor(a) o autores(as) señalan expresamente que la obra es original, ya que sus contenidos son producto de su directa contribución intelectual. Se reconoce también que todos los datos y las referencias a materiales ya publicados están debidamente identificados con su respectivo crédito e incluidos en las notas bibliográficas y en las citas que se destacan como tal.

6. Autorización de publicación

El(los) titular(es) de los derechos de autor otorga a la Universidad Nacional Toribio Rodríguez de Mendoza de Amazonas (UNTRM), la autorización para la publicación del documento indicado en el punto 2, bajo la *Licencia creative commons* de tipo BY-NC: Licencia que permite distribuir, remezclar, retocar, y crear a partir de su obra de forma no comercial por lo que la Universidad deberá publicar la obra poniéndola en acceso libre en el repositorio institucional de la UNTRM y a su vez en el Registro Nacional de Trabajos de Investigación-RENATI, dejando constancia que el archivo digital que se está entregando, contiene la versión final del documento sustentado y aprobado por el Jurado Evaluador.

Chachapoyas, 09 de Febrero de 2024

Firma del autor 1

Firma del Asesor 1

Firma del autor 2

Firma del Asesor 2

DEDICATORIA

Agradezco a Diosito por darme la fuerza para seguir adelante y permitir cumplir con uno de mis objetivos en esta etapa universitaria, por no haberme abandonado y ser mi fortaleza.

A mis padres (Bertha, Manuel & Emeterio) por el apoyo incondicional, por darme la fuerza, valentía y su confianza durante mi formación universitaria.

A mis hermanitos (Darwin & Brayán) por su apoyo, confianza y comprensión, ustedes son el mejor regalo que la vida me dio, son un ejemplo a seguir, ustedes han sido mi soporte durante mi formación académica.

A mi angelito (José Eyder) por cuidarme y protegerme desde el cielo, este logro te lo dedico a ti hermanito.

A mi princesa hermosa, hija Bianca Kathaleya por ser mi más grande motivación, por el hermoso regalo que Diosito me dio en esta vida, por ser el motor y motivo para seguir adelante y así cumplir mis metas.

A mi pareja Jose Estaly Rojas Soplin, por su apoyo, confianza y comprensión que me brinda día a día para seguir adelante y hacer realidad este sueño.

Geidy Salon Llanos

AGRADECIMIENTO

En primer lugar, Agradecer a Diosito y a mis padres y hermanos por su apoyo incondicional y por permitirme cumplir con uno de mis metas, por no haberme abandonado todo este tiempo y ser mi fortaleza durante mi formación universitaria.

Agradecer a mi asesor Al Dr. Efraín Manuelito Castro Alayo y a mis co- asesores Al Ing. Ms. César Rafael Balcázar Zumaeta y a la Ing. Llisela Torrejon Valqui, muchísimas gracias por su dedicación, confianza, tiempo y paciencia durante el desarrollo del proyecto.

A la Dra. Ilse S. Cayo Colca responsable técnico del proyecto “CRISTALIZACIÓN Y POLIMORFISMO DE LA MANTECA DE CACAO EN GRANOS DE DIFERENTES ORIGENES GEOGRAFICOS Y SU IMPACTO EN LA CALIDAD DE CHOCOLATES FINOS “muchísimas gracias por darme la oportunidad de pertenecer al proyecto y así poder hacer mi tesis.

A PROCIENCIA – CONTRATO N°-501077920-2022, Proyecto de investigación “CRISTALIZACIÓN Y POLIMORFISMO DE LA MANTECA DE CACAO EN GRANOS DE DIFERENTES ORIGENES GEOGRAFICOS Y SU IMPACTO EN LA CALIDAD DE CHOCOLATES FINOS” Por el financiamiento de la presente tesis titulada: Caracterización Química de Guanábana, Chirimoya y Piña Usando Microscopia Confocal Raman y Quimiometría.

**AUTORIDADES DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL TORIBIO RODRÍGUEZ
DE MENDOZA DE AMAZONAS**

Ph.D. JORGE LUIS MAICELO QUINTANA
Rector

Dr. OSCAR ANDRÉS GAMARRA TORRES
Vicerrector Académico

Dra. MARÍA NELLY LUJÁN ESPINOZA
Vicerrectora de Investigación

Dr. ERICK ALDO AUQUIÑIVIN SILVA
Decano de la Facultad de Ingeniería y Ciencias Agrarias

VISTO BUENO DEL ASESOR DE TESIS



ANEXO 3-L

VISTO BUENO DEL ASESOR DE TESIS PARA OBTENER EL TÍTULO PROFESIONAL

El que suscribe el presente, docente de la UNTRM ()/Profesional externo (), hace constar que ha asesorado la realización de la Tesis titulada Caracterización Química de Guanábana, Chirimoya y Piña Usando Microscopia Confocal Raman y Quimiometría. ; del egresado Geidy Salon Llanos de la Facultad de Ingeniería y Ciencias Agrarias Escuela Profesional de Ingeniería Agroindustrial de esta Casa Superior de Estudios.

El suscrito da el Visto Bueno a la Tesis mencionada, dándole pase para que sea sometida a la revisión por el Jurado Evaluador, comprometiéndose a supervisar el levantamiento de observaciones que formulen en Acta en conjunto, y estar presente en la sustentación.



Chachapoyas, 20 de Octubre de 2023

Firma y nombre completo del Asesor
Dr. Efraín Manuelito Castro Alayo

VISTO BUENO DEL ASESOR DE TESIS



ANEXO 3-L

VISTO BUENO DEL ASESOR DE TESIS PARA OBTENER EL TÍTULO PROFESIONAL

El que suscribe el presente, docente de la UNTRM (X)/Profesional externo (), hace constar que ha asesorado la realización de la Tesis titulada Caracterización Química de Guanábana, Chirimoya y Piña Usando Microscopia Confocal Raman y Ovimiometria. del egresado Geidy Salon Llanos de la Facultad de Ingeniería y Ciencias Agrarias Escuela Profesional de Ingeniería Agroindustrial de esta Casa Superior de Estudios.

El suscrito da el Visto Bueno a la Tesis mencionada, dándole pase para que sea sometida a la revisión por el Jurado Evaluador, comprometiéndose a supervisar el levantamiento de observaciones que formulen en Acta en conjunto, y estar presente en la sustentación.



Chachapoyas, 20 de Octubre de 2023


Firma y nombre completo del Asesor
Ms. César Rafael Balcázar Zumaeta

VISTO BUENO DEL ASESOR DE TESIS



UNTRM

REGLAMENTO GENERAL

PARA EL OTORGAMIENTO DEL GRADO ACADÉMICO DE
BACHILLER, MAESTRO O DOCTOR Y DEL TÍTULO PROFESIONAL

ANEXO 3-L

VISTO BUENO DEL ASESOR DE TESIS PARA OBTENER EL TÍTULO PROFESIONAL

El que suscribe el presente, docente de la UNTRM (X)/Profesional externo (), hace constar que ha asesorado la realización de la Tesis titulada Caracterización Química de Guanábana, Chirimoya y Piña Usando Microscopia Confocal Raman y Ovimiometría; del egresado Geidy Salon Llanos de la Facultad de Ingeniería y Ciencias Agrarias Escuela Profesional de Ingeniería Agroindustrial de esta Casa Superior de Estudios.

El suscrito da el Visto Bueno a la Tesis mencionada, dándole pase para que sea sometida a la revisión por el Jurado Evaluador, comprometiéndose a supervisar el levantamiento de observaciones que formulen en Acta en conjunto, y estar presente en la sustentación.



Chachapoyas, 20 de octubre de 2023

Firma y nombre completo del Asesor
Ing. Lisela Torrejon Valqui

JURADO EVALUADOR DE LA TESIS



Dr. ARMSTRONG BARNARD FERNANDEZ JERI

Presidente



Ms. ROBERT JAVIER CRUZALEGUI FERNANDEZ

Secretario



Ms. DINER MORI MESTANZA

Vocal

CONSTANCIA DE ORIGINALIDAD DE LA TESIS



UNTRM

REGLAMENTO GENERAL
PARA EL OTORGAMIENTO DEL GRADO ACADÉMICO DE
BACHILLER, MAESTRO O DOCTOR Y DEL TÍTULO PROFESIONAL

ANEXO 3-Q

CONSTANCIA DE ORIGINALIDAD DE LA TESIS PARA OBTENER EL TÍTULO PROFESIONAL

Los suscritos, miembros del Jurado Evaluador de la Tesis titulada:

Caracterización Química de Guanábana, Chirimoya y
Piña Usando Microscopia Confocal Raman y Quimiometría.

presentada por el estudiante ()/egresado (x) Geidy Salon Llanos

de la Escuela Profesional de Ingeniería Agroindustrial

con correo electrónico institucional G17S187552@untrm.edu.pe

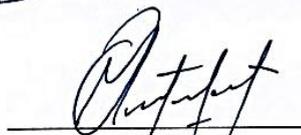
después de revisar con el software Turnitin el contenido de la citada Tesis, acordamos:

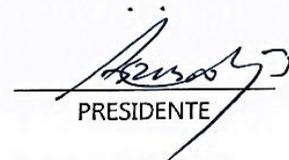
- La citada Tesis tiene 20 % de similitud, según el reporte del software Turnitin que se adjunta a la presente, el que es menor (x) / igual () al 25% de similitud que es el máximo permitido en la UNTRM.
- La citada Tesis tiene _____ % de similitud, según el reporte del software Turnitin que se adjunta a la presente, el que es mayor al 25% de similitud que es el máximo permitido en la UNTRM, por lo que el aspirante debe revisar su Tesis para corregir la redacción de acuerdo al Informe Turnitin que se adjunta a la presente. Debe presentar al Presidente del Jurado Evaluador su Tesis corregida para nueva revisión con el software Turnitin.



Chachapoyas, 02 de NOVIEMBRE del 2023


SECRETARIO


VOCAL


PRESIDENTE

OBSERVACIONES:

.....
.....

ACTA DE SUSTENTACIÓN DE LA TESIS



UNTRM

REGLAMENTO GENERAL
PARA EL OTORGAMIENTO DEL GRADO ACADÉMICO DE
BACHILLER, MAESTRO O DOCTOR Y DEL TÍTULO PROFESIONAL

ANEXO 3-5

ACTA DE SUSTENTACIÓN DE TESIS PARA OBTENER EL TÍTULO PROFESIONAL

En la ciudad de Chachapoyas, el día 16 de Noviembre del año 2023, siendo las 10:30 horas, el aspirante: Ereidy Salon Llanos, asesorado por Efraín Manuelito Castro Alayo defiende en sesión pública presencial () / a distancia () la Tesis titulada: Caracterización química de guanábana, chirimoya y piña usando microscopía confocal Raman y quimiometría, para obtener el Título Profesional de Ingeniero Agroindustrial a ser otorgado por la Universidad Nacional Toribio Rodríguez de Mendoza de Amazonas; ante el Jurado Evaluador, constituido por:

Presidente: Arastang Barmaid Fernández Teri
Secretario: Robert Javier Cruzalegui Fernández
Vocal: Diner Mori Mejía

Procedió el aspirante a hacer la exposición de la Introducción, Material y métodos, Resultados, Discusión y Conclusiones, haciendo especial mención de sus aportaciones originales. Terminada la defensa de la Tesis presentada, los miembros del Jurado Evaluador pasaron a exponer su opinión sobre la misma, formulando cuantas cuestiones y objeciones consideraron oportunas, las cuales fueron contestadas por el aspirante.



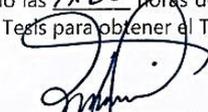
Tras la intervención de los miembros del Jurado Evaluador y las oportunas respuestas del aspirante, el Presidente abre un turno de intervenciones para los presentes en el acto de sustentación, para que formulen las cuestiones u objeciones que consideren pertinentes.

Seguidamente, a puerta cerrada, el Jurado Evaluador determinó la calificación global concedida a la sustentación de la Tesis para obtener el Título Profesional, en términos de:

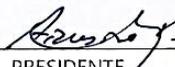
Aprobado () por Unanimidad () / Mayoría () Desaprobado ()

Otorgada la calificación, el Secretario del Jurado Evaluador lee la presente Acta en esta misma sesión pública. A continuación se levanta la sesión.

Siendo las 11:20 horas del mismo día y fecha, el Jurado Evaluador concluye el acto de sustentación de la Tesis para obtener el Título Profesional.


SECRETARIO


VOCAL


PRESIDENTE

OBSERVACIONES:

ÍNDICE GENERAL

AUTORIZACIÓN DE PUBLICACIÓN DE TESIS EN EL REPOSITORIO INSTITUCIONAL DE LA UNTRM	ii
DEDICATORIA.....	iii
AGRADECIMIENTO.....	iv
AUTORIDADES DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL TORIBIO RODRÍGUEZ DE MENDOZA DE AMAZONAS	v
VISTO BUENO DEL ASESOR DE TESIS	vi
VISTO BUENO DEL ASESOR DE TESIS	vii
VISTO BUENO DEL ASESOR DE TESIS	viii
JURADO EVALUADOR DE LA TESIS	ix
CONSTANCIA DE ORIGINALIDAD DE LA TESIS	x
ACTA DE SUSTENTACIÓN DE LA TESIS	xi
ÍNDICE GENERAL.....	xii
ÍNDICE DE TABLAS.....	xiv
ÍNDICE DE FIGURAS	xv
RESUMEN.....	xvi
ABSTRACT	xvii
I. INTRODUCCIÓN	18
II. MATERIAL Y MÉTODOS	20
2.1. Material /Área de estudio	20
2.2. Métodos y Técnicas	20
2.3. Espectroscopia Raman.....	20
2.4. Análisis de datos.....	21
III. RESULTADOS	22
3.1. Caracterización de los espectros Raman de frutas tropicales	22
3.3. Análisis de componentes principales.....	24

IV. DISCUSIÓN.....	33
V. CONCLUSIONES	37
VI. RECOMENDACIONES	38
VII. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	39
ANEXOS.....	44

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Efecto de cuatro métodos de preprocesamiento de datos en el modelo PCA para chirimoya, guanábana y piña.....	44
Tabla 2. Resultados de clasificación del modelo PLS-DA.....	44
Tabla 3. Asignaciones de picos raman para patrones de azúcar y chirimoya (annona cherimola), guanábana (annona muricata l.), piña (ananas comosus l. merr).	45
Tabla 4. Resultados del modelo PCA con distintos métodos de preprocesamiento.	46
Tabla 5. Resultado del modelo PLS-DA con diferentes métodos de preprocesamiento.	47

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Espectro Raman de glucosa, fructosa, sacarosa, de chirimoya (<i>Annona cherimola</i>), guanábana (<i>Annona muricata</i> L.) y piña (<i>Ananas comosus</i> L. Merr) para su identificación química.....	22
Figura 2. Espectro Raman bruto (a) y corregido (b) de chirimoya (<i>Annona cherimola</i>), guanábana (<i>Annona muricata</i> L.) y piña (<i>Ananas comosus</i> L. Merr) para el análisis quimiométrico.	23
Figura 3. Espectro preprocesado con centrado medio (a), método de la primera derivada de Savitzky-Golay (b), Segunda derivada de Savitzky-Golay (c), Tercera derivada de Savitzky-Golay (d).....	24
Figura 4. Q frente a T2 de Hotelling en el modelo PCA. Ambos parámetros son bajos al 95%. Método de preprocesamiento de centrado medio (a), Primer derivada de Savitzky-Golay (b), Segunda derivada de Savitzky-Golay (c), Tercera derivada de Savitzky-Golay (d).	26
Figura 5. Puntuaciones y cargas del PCA con el método de preprocesamiento de centrado de medias (a,b), la primera derivada de Savitzky-Golay (c,d) y la tercera derivada de Savitzky-Golay (d). (c,d), Segunda derivada de Savitzky-Golay (e,f), Tercera derivada de S Savitzky-Golay (g,h).	28
Figura 6. Curvas ROC para el método de preprocesamiento de la primera derivada de Savitzky-Golay.....	31
Figura 7. Frutos dulces (Guanábana, Chirimoya Piña).....	48
Figura 8. Cortado de frutos Dulces (Guanábana, Chirimoya y Piña).	49
Figura 9. Liofilización de las muestras de frutos dulces (Guanábana, Chirimoya. Piña).	49
Figura 10. Análisis de las muestras por Espectroscopia confocal Raman.....	50

RESUMEN

En el presente trabajo se utilizó la espectroscopia confocal Raman y el Análisis Discriminante de Mínimos Cuadrados Parciales (PLS-DA) para establecer un modelo de clasificación entre las tres frutas y evaluar el efecto de los métodos de preprocesado en el rendimiento del modelo. Las frutas tropicales como la chirimoya, la guanábana y la piña contienen azúcares (glucosa, fructosa y sacarosa) en común, pero pueden diferir en el contenido de otros fitoquímicos. Los espectros Raman mostraron que la glucosa estaba presente en los frutos en la banda 800-900 cm^{-1} y en la banda 1100-1200 cm^{-1} . Mientras que la sacarosa se encontró presente en la banda de 1131,22 cm^{-1} , 1134,44 cm^{-1} y 1133,37 cm^{-1} ; en las tres frutas. La fructosa estuvo presente en la banda de 1464,22 cm^{-1} , 1467,44 cm^{-1} y 1464,22 cm^{-1} en chirimoya, guanábana y piña. La precisión del modelo PLS-DA varió en función de los métodos de preprocesamiento utilizados. El método de preprocesamiento Savitzky-Golay de primera derivada produjo un modelo con una precisión del 98,69-100% y del 100% en los datos de entrenamiento y predicción, respectivamente.

Palabras clave: PLS-DA, espectroscopia Raman, quimiometría, fruta tropical, azúcares.

ABSTRACT

In the present work, confocal Raman spectroscopy and Partial Least Squares Discriminant Analysis (PLS-DA) were used to establish a classification model among the three fruits and to evaluate the effect of preprocessing methods on the model's performance. Tropical fruits such as cherimoya, soursop and pineapple contain sugars (glucose, fructose and sucrose) in common, but may differ in the content of other phytochemicals. The Raman spectra showed that glucose was present in the fruits in the 800-900 cm^{-1} band and the 1100-1200 cm^{-1} band. While sucrose was present in the band of 1131,22 cm^{-1} , 1134,44 cm^{-1} and 1133,37 cm^{-1} ; in the three fruits. Fructose was present in the band of 1464,22 cm^{-1} , 1467,44 cm^{-1} and 1464,22 cm^{-1} in cherimoya, soursop and pineapple. The accuracy of the PLS-DA model varied according to the preprocessing methods used. The first derivative Savitzky-Golay preprocessing method, produced a model with 98.69-100% and 100% precision on the training and prediction data, respectively.

Keywords: PLS-DA, Raman spectroscopy, chemometrics, tropical fruit, sugars.

I. INTRODUCCIÓN

Las frutas tropicales contienen muchos compuestos biológicamente activos como polisacáridos, polifenoles, vitaminas, fibra y carotenoides (Mohan et al., 2020). La chirimoya (*Annona cherimola*) es rica en carbohidratos fermentables, especialmente glucosa y fructosa (Isas et al., 2020). Esta especie es probablemente originaria de la zona comprendida entre Ecuador y Perú y se cultiva desde el año 1200 a.C., durante el Imperio Inca (Perrone et al., 2022). Del mismo modo, la guanábana (*Annona muricata* L.) es originaria de América tropical y África (Monarres-Cuevas et al., 2022); su pulpa blanca constituye más del 80% del fruto, compuesta principalmente por agua, azúcares no reductores e hidratos de carbono (Berumen & Varela et al., 2019). La piña (*Ananas comosus* L. Merr) es una de las frutas más populares del mundo, ampliamente distribuida en regiones tropicales y depende en gran medida de su atractivo aroma y dulce sabor (Zhou et al., 2021). La piña es un cultivo económicamente importante en las regiones tropicales y subtropicales y su dulzor determina su calidad (Dorey et al. 2016); además, sus azúcares solubles como la sacarosa, la glucosa y la fructosa son responsables del sabor dulce de la piña recién cortada (Zhou et al., 2021), pero también tienen otros componentes fitoquímicos que pueden crear diferencias entre estas tres frutas.

Dado que los métodos analíticos para la autenticación de alimentos son muy caros, llevan mucho tiempo y requieren la preparación de muestras, es necesario desarrollar un método rápido y no destructivo (Kolašinac et al., 2022). Afortunadamente, la espectroscopia confocal Raman (RCS) es una nueva tecnología cuyo uso está aumentando, especialmente en el campo de la seguridad alimentaria; con esta tecnología, es posible detectar señales de pico mediante la exposición láser de la muestra (Wu et al., 2023).

Además, se han aplicado combinaciones de espectroscopia Raman con métodos quimiométricos para la identificación de características de granos, aceites comestibles y miel (Li et al., 2022), la discriminación de grasas y aceites extraños en crema de leche y yogur (Yazgan et al., 2019), la cuantificación rápida de almidón en productos agrícolas (Nakajima et al., 2023) y la diferenciación de genotipos de semillas de algodón convencionales y transgénica (Mata et al., 2022).

Para ello se utilizan métodos multivariantes como el Análisis de Componentes Principales (PCA) y el Análisis Discriminante de Mínimos Cuadrados Parciales (PLS-DA). El PCA es un método no supervisado que reduce los datos para encontrar similitudes entre las muestras. Al mismo tiempo, PLS-DA es un método supervisado que clasifica las muestras en categorías predefinidas estableciendo una relación interna entre los espectros (X- bloque) y un clasificador (Y- variable) (Kniese et al., 2021).

Por lo tanto, evaluamos la aplicabilidad de la espectroscopia confocal Raman combinada con PLS-DA para diferenciar tres frutas tropicales de la región Amazonas- Perú y el efecto de los métodos de preprocesamiento de datos en el rendimiento del modelo.

II. MATERIAL Y MÉTODOS

2.1. Material /Área de estudio

Para la presente investigación se empleó las muestras de tres frutos dulces de guanábana (*Annona muricata* L.), chirimoya (*Annona cherimola*) y piña (*Ananas comosus* L. Merr) se obtuvieron de un mercado local de la provincia de Bagua, en la región Amazonas-Perú.

Luego los frutos dulces de guanábana, chirimoya y piña fueron trasladados a la Universidad Nacional Toribio Rodríguez de Mendoza, al área del laboratorio de investigación en Ingeniería de los Alimentos y Postcosecha (LIAP) para sus respectivas evaluaciones.

2.2. Métodos y Técnicas

2.2.1. Liofilización

Se realizó en el Laboratorio de postcosecha de la Universidad Nacional Toribio Rodríguez de Mendoza, el liofilizado se trabajó en un equipo liofilizador (LABCONCO, USA) a una presión de 0.008 bar y a -84°C .

Luego se seleccionó los frutos dulces (Guanábana, Chirimoya y Piña), después se hizo su respectiva limpieza, posteriormente se separó las pepas de la pulpa y después se colocaron las muestras en los tubos falcón de 50ml, luego se llevó al liofilizador por un tiempo de 72 horas.

2.3. Espectroscopia Raman

En este estudio se utilizó un sistema de espectrómetro Raman Horiba (Horiba

Scientific, XploRA plus, Montpellier, Francia) equipado con un láser de 532 nm y

785 nm en un microscopio Olympus BX 41. El espectrómetro estaba equipado con una rejilla de 1.200 líneas/mm durante el registro espectral, y un láser de 532 nm se enfocaba sobre la muestra en la platina del microscopio a través de un objetivo de 50 LWD (larga distancia de trabajo) (Olympus, Tokio,

Japón). Las señales de dispersión Raman se detectaron mediante un detector de dispositivo de carga acoplada (CCD), con un rango de detección de 200 a 1700 cm^{-1} en modo extendido. La medición se realizó con un tiempo de integración de 5s, con 10 acumulaciones espectrales y una potencia del láser del filtro del 50%. Los datos espectrales se recogieron utilizando el software LabSpec 6.7.1 (Horiba, Francia). La resolución espectral fue de unos 3 cm^{-1} , y una línea de silicio verificó la calibración en 520,47 cm^{-1} . Los experimentos se realizaron en cinco réplicas de cada fruta para tener en cuenta una posible falta de homogeneidad de la muestra. Se registraron diez espectros por cada réplica, lo que dio como resultado 50 espectros por fruto y 150 espectros en total (Kolašinac et al., 2022). Los picos Raman se asignaron de acuerdo con la bibliografía publicada.

2.4. Análisis de datos

Se realizó un análisis de componentes principales (PCA) con el programa SoloMIA para reducir la dimensionalidad de las intensidades espectrales. El PCA se realizó para evaluar el potencial simple de formación de conglomerados por tipo de fruta. Utilizando a los estadísticos T2 y Q residual de Hotelling para identificar y eliminar los espectros anómalos considerados como valores atípicos (Kniese et al., 2021). Se calcularon los estadísticos T2 y Q residual de Hotelling con una confianza del 95%. Para realizar el Análisis Discriminante de Mínimos Cuadrados Parciales (PLS-DA); un método de clasificación multivariante, todos los datos se dividieron en los conjuntos de calibración y prueba (75% y 25% de las muestras, respectivamente) utilizando el enfoque de Kennard-StoneM (Kolašinac et al., 2022). El valor más alto de sensibilidad (SE), especificidad (SP) y precisión (P) evaluó la bondad de los modelos basándose en el conjunto de datos de entrenamiento y predicción. La precisión (P) indica qué fracción de las predicciones como clase positiva fueron positivas, la sensibilidad (SE) o tasa de verdaderos positivos, se refiere al porcentaje de muestras de una clase determinada que el modelo reconoce correctamente como pertenecientes a esa clase; la especificidad (SP) o tasa de verdaderos negativos se refiere a las muestras no pertenecientes a una clase determinada que el modelo rechaza correctamente (Logan et al., 2022).

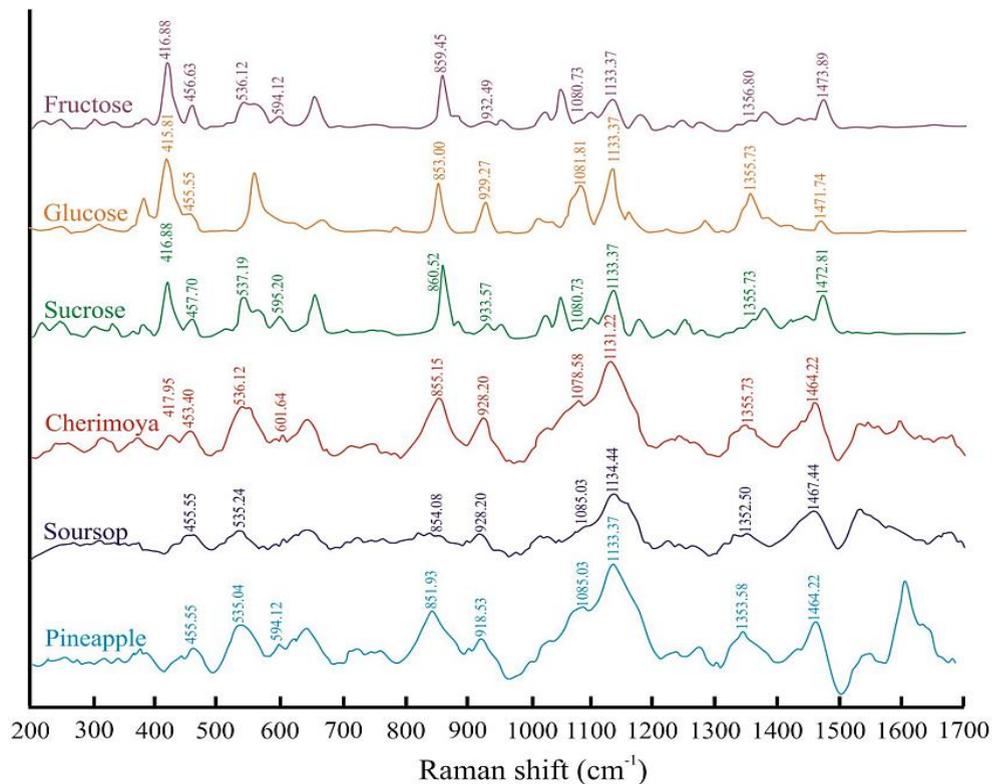
III. RESULTADOS

3.1. Caracterización de los espectros Raman de frutas tropicales

En la figura 1 se evidencia que la glucosa estuvo presente con mayor intensidad en la chirimoya y la piña a $855,15 \text{ cm}^{-1}$ y $851,93 \text{ cm}^{-1}$, respectivamente, y con menor intensidad en la guanábana ($854,08 \text{ cm}^{-1}$). Mientras que la sacarosa se encontró a $1131,22 \text{ cm}^{-1}$, $1134,44 \text{ cm}^{-1}$ y $1133,37 \text{ cm}^{-1}$; en chirimoya, guanábana y piña, respectivamente. asignando vibraciones de tijera CH₂, en las bandas Raman a $1472\text{-}1454 \text{ cm}^{-1}$, la fructosa contiene picos a $1464,22 \text{ cm}^{-1}$, $1467,44 \text{ cm}^{-1}$ y

$1464,22 \text{ cm}^{-1}$ en chirimoya, guanábana y piña, respectivamente, sin embargo, el pico correspondiente a la vibración $\beta(\text{CCO})$ la fructosa estaba ausente en la guanábana.

Figura 1. Espectro Raman de glucosa, fructosa, sacarosa, de chirimoya (*Annona cherimola*), guanábana (*Annona muricata L.*) y piña (*Ananas comosus L. Merr*) para su identificación química.

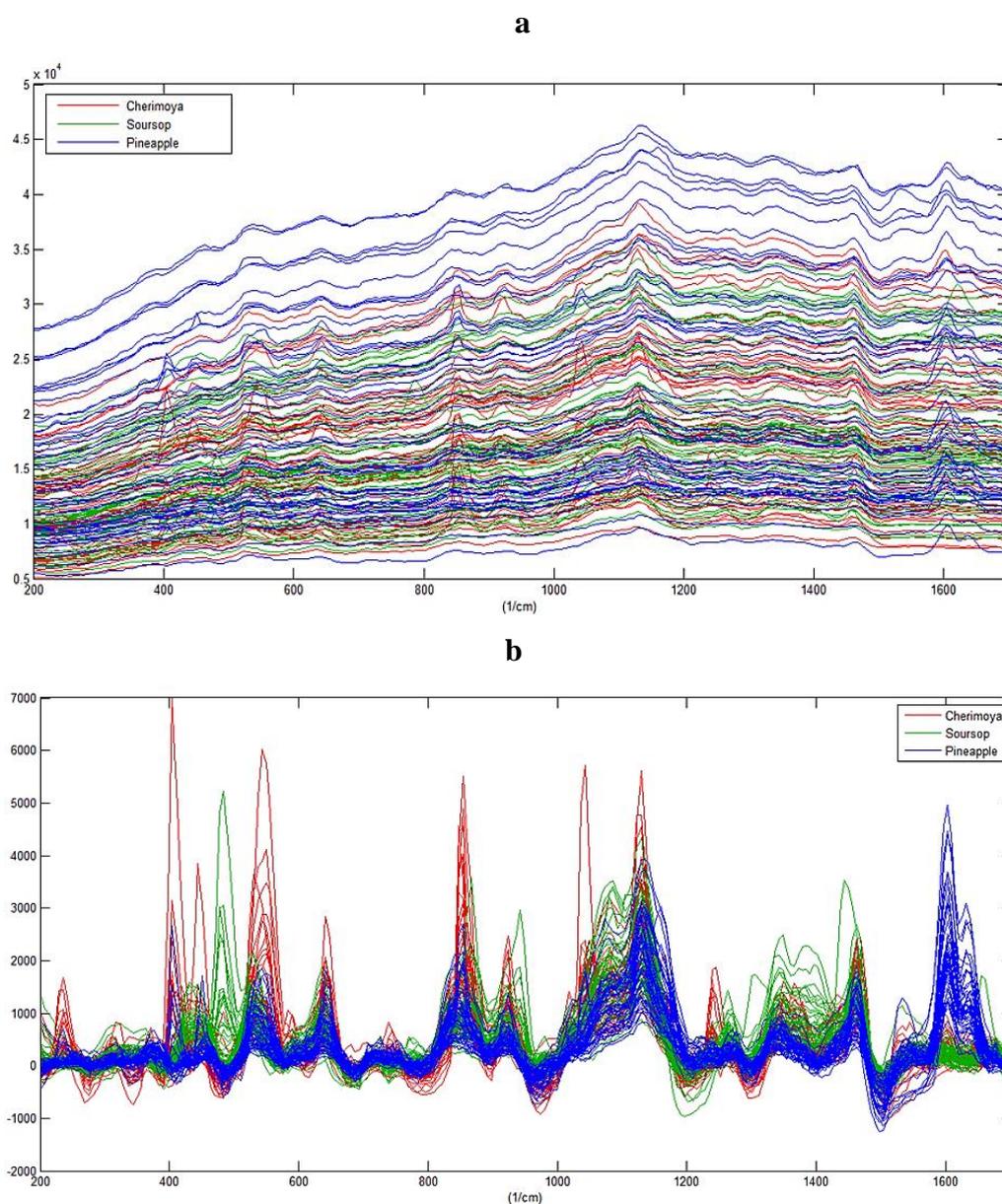


3.2. Análisis multivariante

Para realizar el análisis quimiométrico, se corrigió los espectros brutos porque contenían fluorescencia, como en el caso de la Figura 2.

Para ello, los espectros se corrigieron con un polinomio de grado 7- base, mostrando en la figura 2 como resultados picos característicos de la composición química de chirimoya, guanábana y piña.

Figura 2. *Espectro Raman bruto (a) y corregido (b) de chirimoya (Annona cherimola), guanábana (Annona muricata L.) y piña (Ananas comosus L. Merr) para el análisis quimiométrico.*

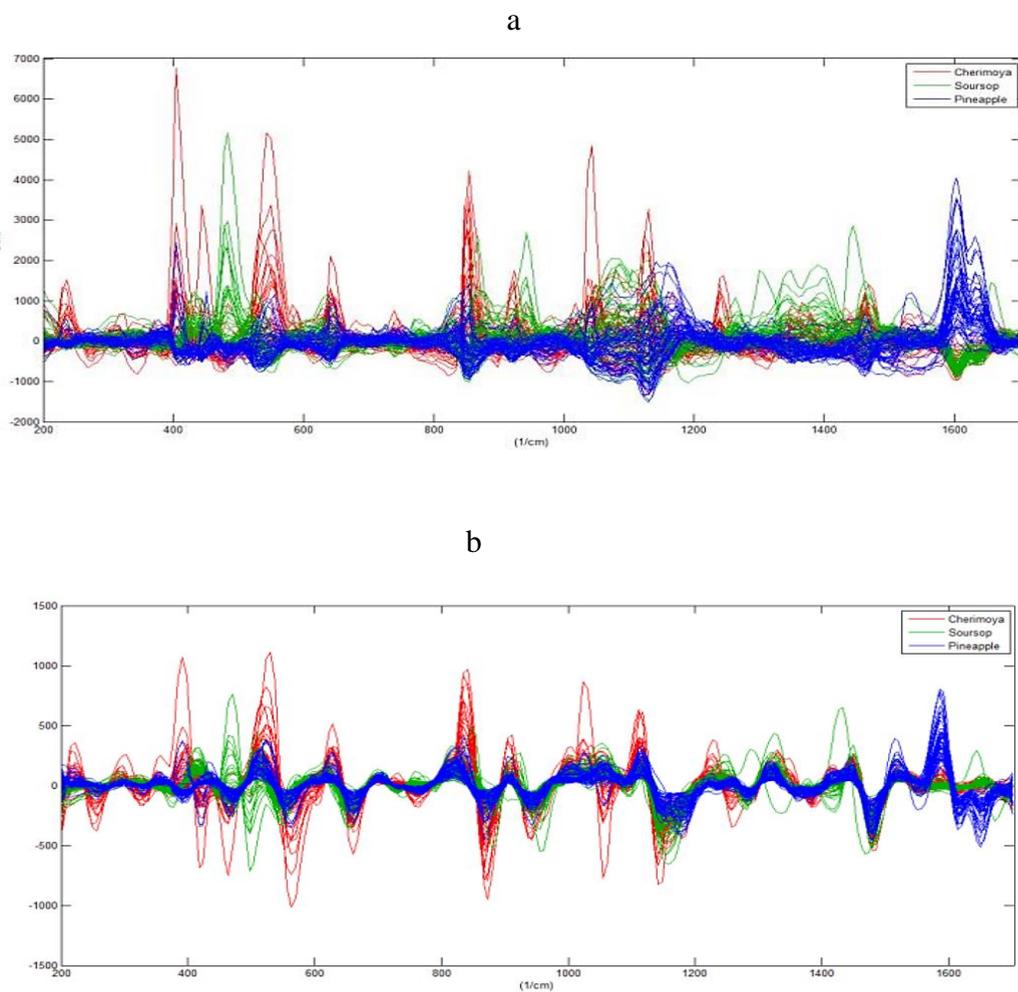


3.3. Análisis de componentes principales

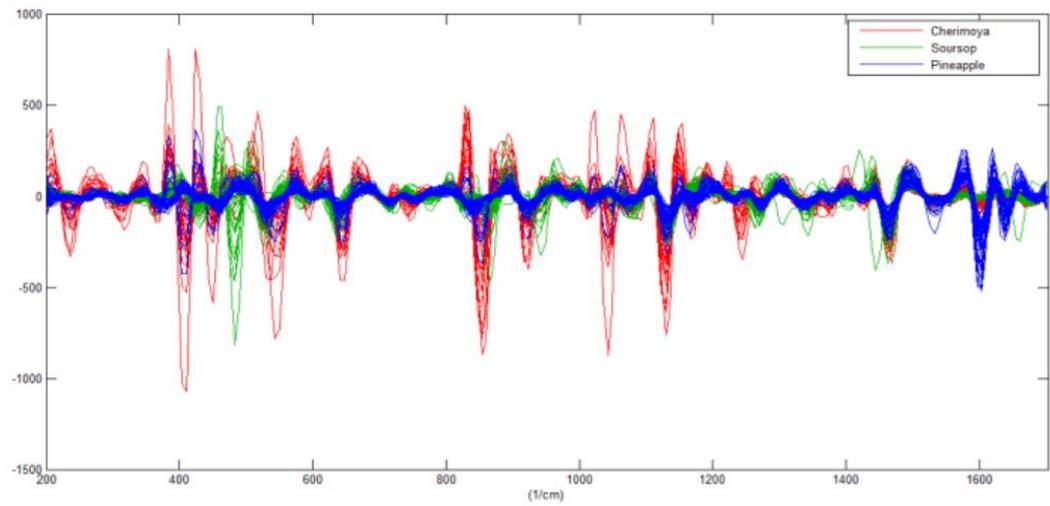
La Figura 3 se muestra los cuatro métodos de preprocesamiento aplicados al conjunto de datos espectrales de chirimoya, guanábana y piña.

La primera, segunda y tercera derivadas de los métodos de preprocesamiento Savitzky-Golay (Figura 3b, 3c y 3d, respectivamente) produjeron cambios más visibles en los espectros corregidos que el método de centrado medio (Figura 3a); estos cambios se observan en las intensidades y posiciones de los picos.

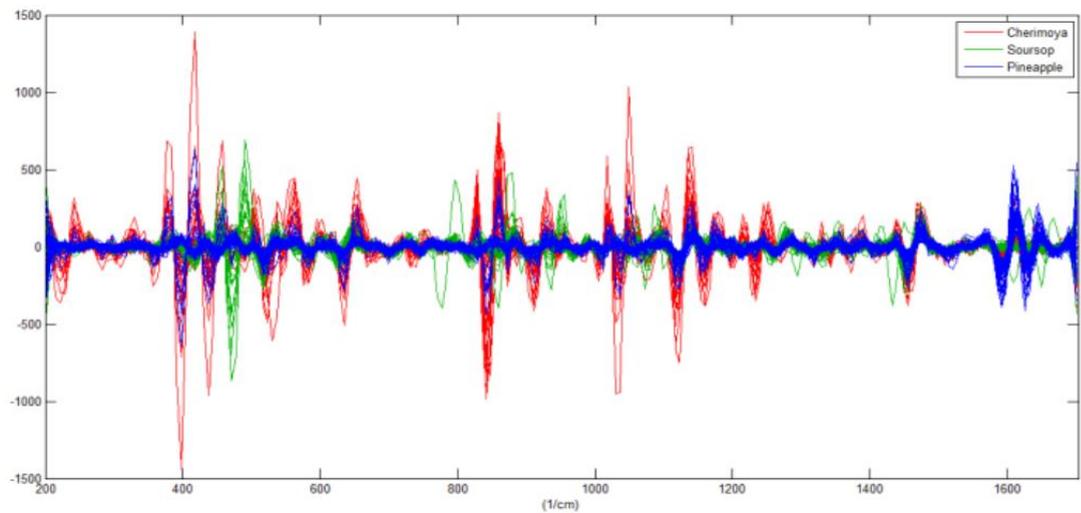
Figura 3. *Espectro preprocesado con centrado medio (a), método de la primera derivada de Savitzky-Golay (b), Segunda derivada de Savitzky-Golay (c), Tercera derivada de Savitzky-Golay (d).*



c



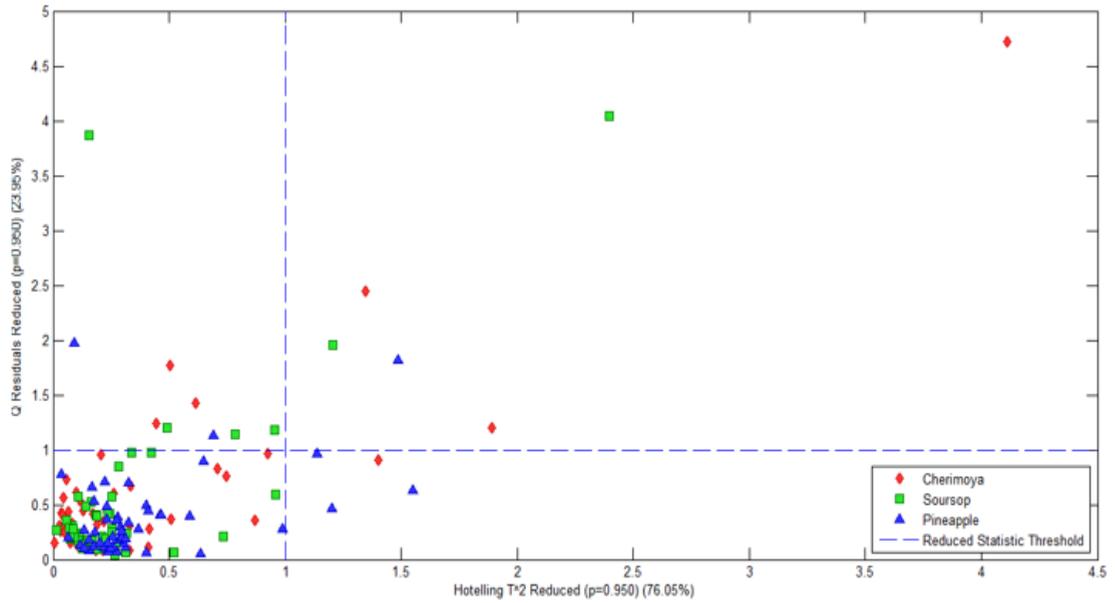
d



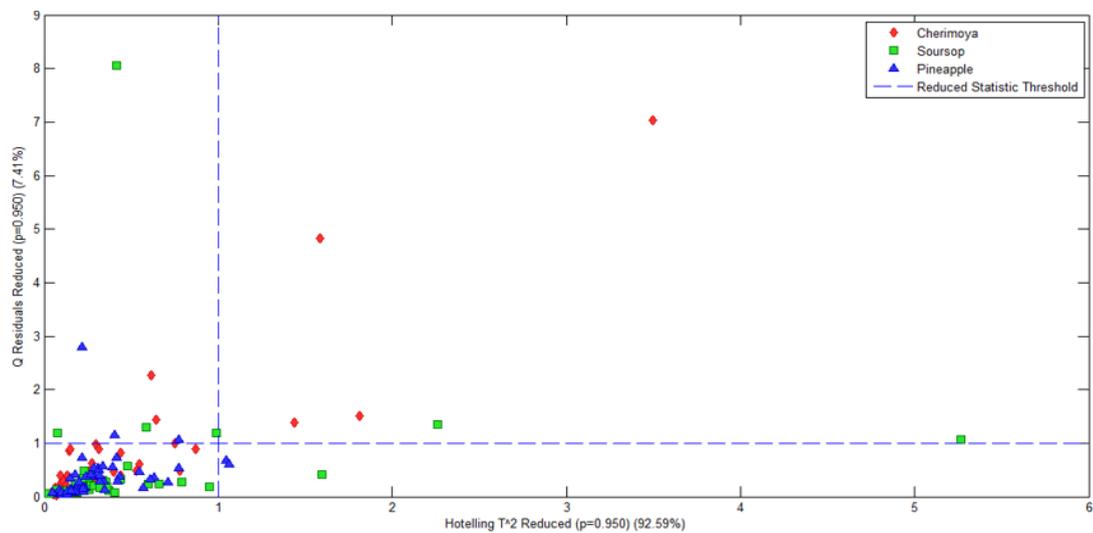
En la Figura 3, obtenida tras eliminar dos valores atípicos muestra que la chirimoya tiende a separarse de los otros frutos con los cuatro métodos de preprocesamiento. Sin embargo, en ninguno de ellos se convirtió en un valor atípico, ya que como máximo alcanza el 95%.

Figura 4. Q frente a T^2 de Hotelling en el modelo PCA. Ambos parámetros son bajos al 95%. Método de preprocesamiento de centrado medio (a), Primer derivada de Savitzky-Golay (b), Segunda derivada de Savitzky-Golay (c), Tercera derivada de Savitzky-Golay (d).

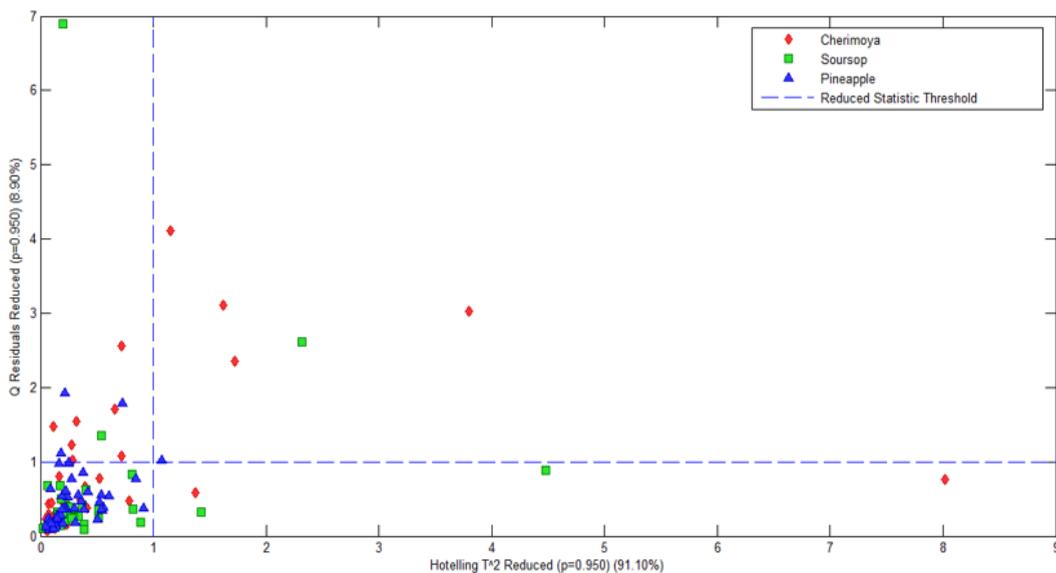
a



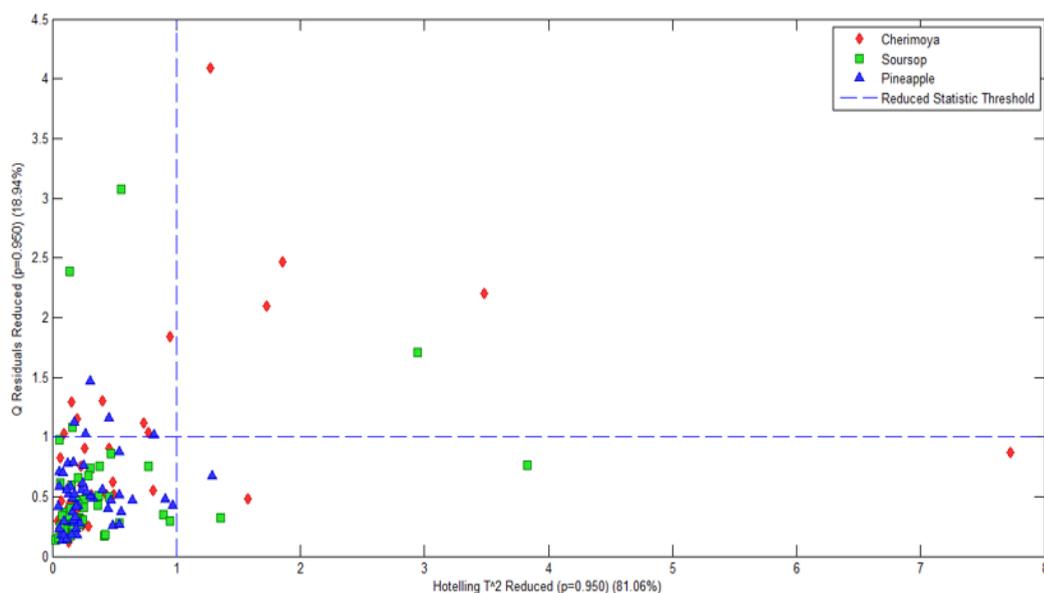
b



c

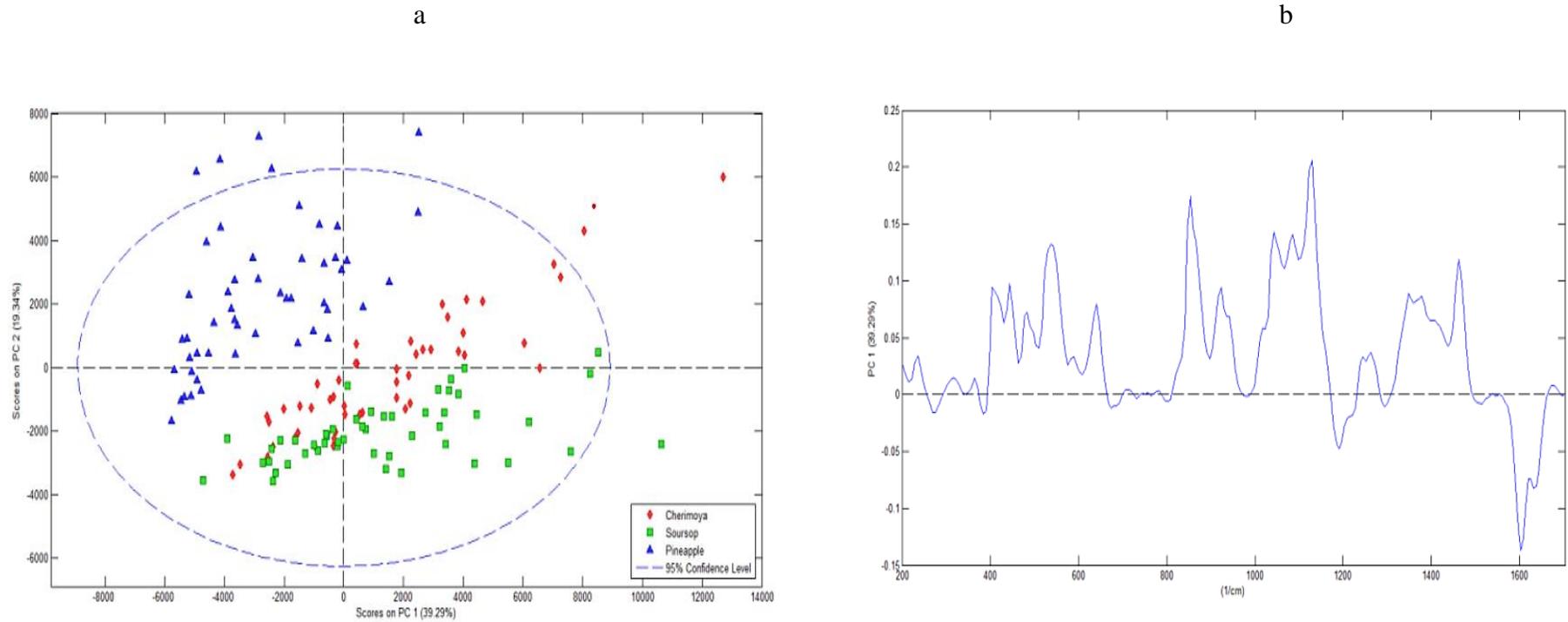


d

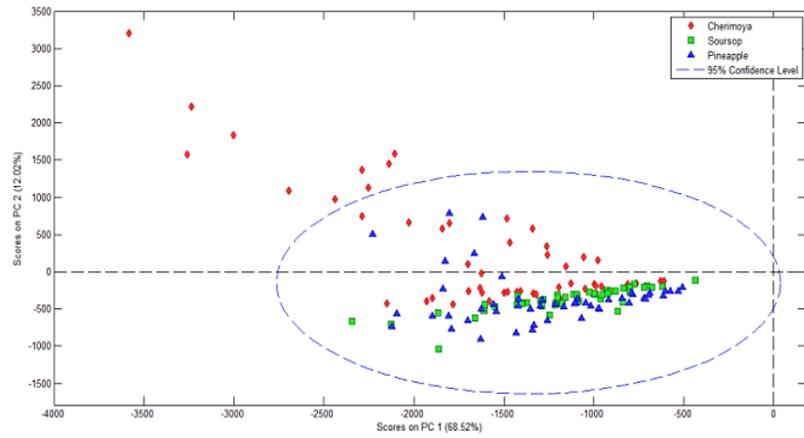


La chirimoya y la guanábana forman conglomerados más cercanos entre sí porque comparten muchos picos Raman a diferencia de la piña además en el diagrama de carga del primer componente principal producido por los cuatro métodos de preprocesamiento. (Figura 5) muestra picos más pronunciados en la banda de 1000 a 1200 cm^{-1} , la región donde se encuentra el pico característico de la glucosa para las tres frutas.

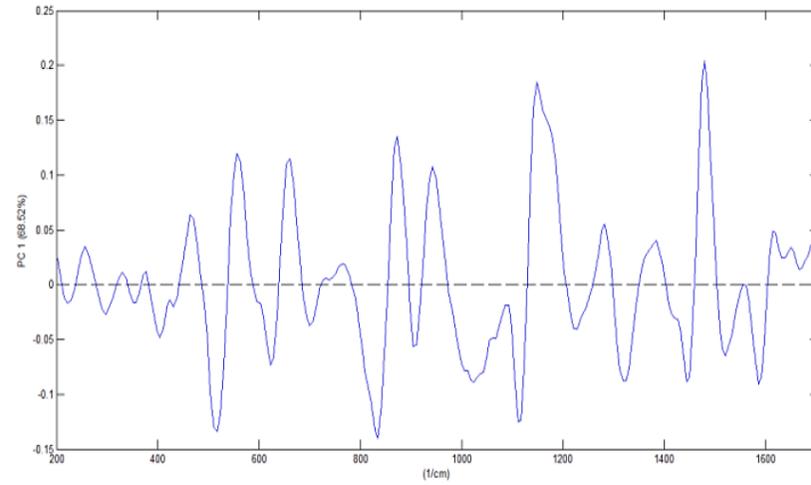
Figura 5. Puntuaciones y cargas del PCA con el método de preprocesamiento de centrado de medias (a,b), la primera derivada de Savitzky-Golay (c,d) y la tercera derivada de Savitzky-Golay (d). (c,d), Segunda derivada de Savitzky-Golay (e,f), Tercera derivada de Savitzky-Golay (g,h).



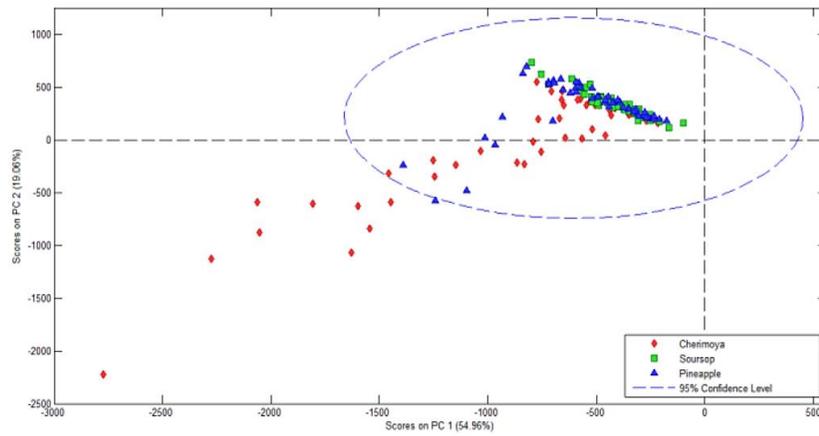
c



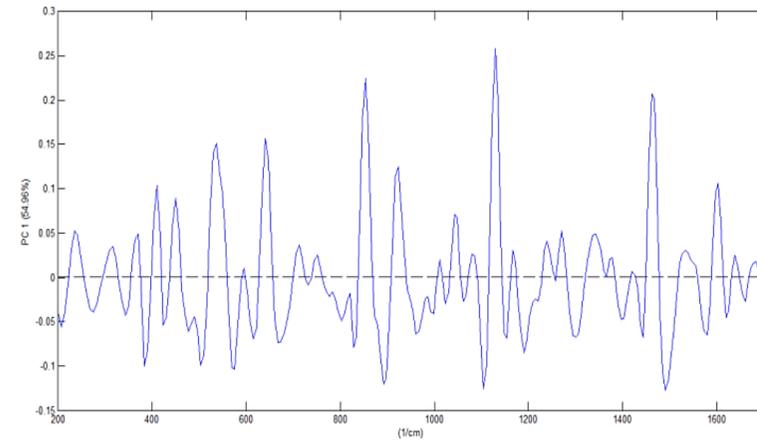
d



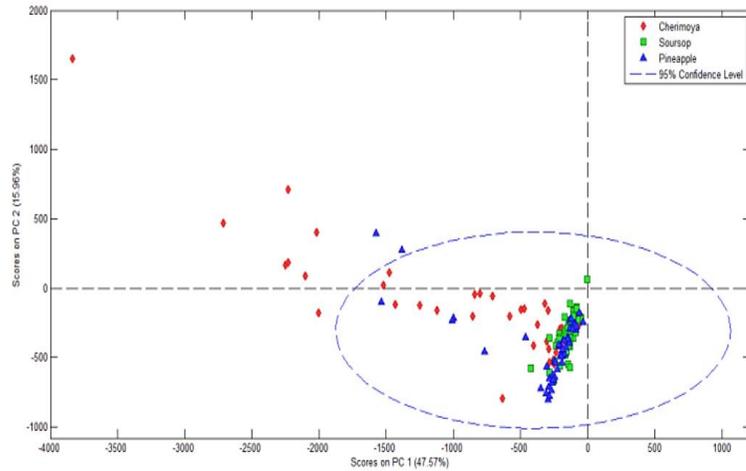
e



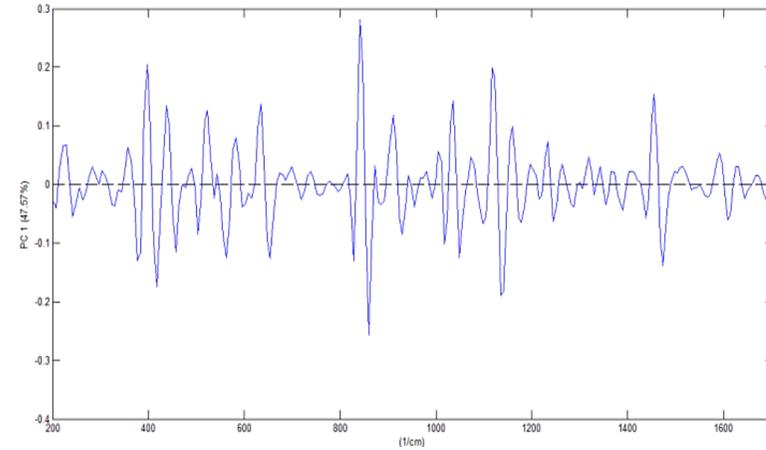
f



g



h

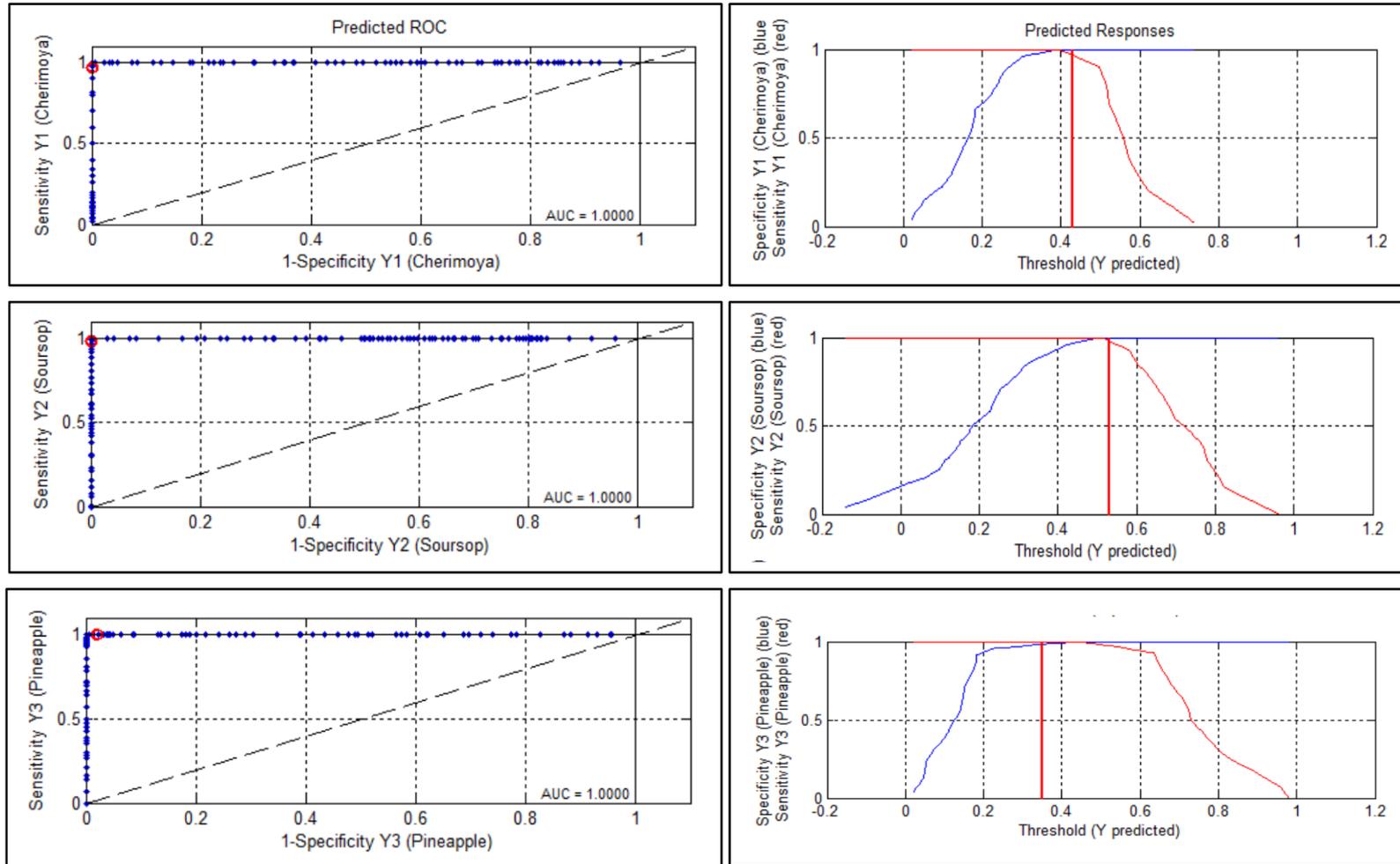


3.4. Análisis discriminante de mínimos cuadrados parciales

En la Tabla 1 se muestra los resultados del modelo PLS-DA aplicado a frutas tropicales con los cuatro métodos de preprocesamiento estudiados (todos los resultados están en la Tabla 5). Donde el centrado medio y la primera derivada de los métodos de preprocesamiento SG muestran los mejores resultados de predicción, cuya precisión es del 100% en todas las frutas tropicales, el conjunto de datos de entrenamiento, la precisión fue del 93,06-100% y del 98,68- 100%, para el centrado medio y la primera derivada del método de preprocesamiento SG, respectivamente.

Con la segunda y tercera derivadas de los métodos de preprocesamiento SG, la precisión fue del 80-100% y del 84,44-100% en los conjuntos de datos de predicción y entrenamiento, respectivamente.

Figura 6. Curvas ROC para el método de preprocesamiento de la primera derivada de Savitzky-Golay.



En la figura 6 se evidencia las curvas ROC de la chirimoya, la guanábana y la piña se situaron más cerca de la esquina superior izquierda del espacio ROC, lo que indica que el método de preprocesamiento de la primera derivada SG produciendo un modelo PLS-DA con un rendimiento óptimo.

IV. DISCUSIÓN

El núcleo de la piña contiene cantidades significativamente mayores de fructosa y glucosa (Banerjee et al., 2018). Mientras tanto, la guanábana contiene hidratos de carbono, proteínas, folato, calcio, fósforo, hierro y vitamina C (Lopes Leivas et al.,

2023) (Agu & Okolie, 2017). Schulz & Baranska, (2007) informaron que la sacarosa muestra los picos característicos de la glucosa (847cm^{-1}) y la fructosa (868 cm^{-1}). En este trabajo, la glucosa estuvo presente con mayor intensidad en la chirimoya y la piña a $855,15\text{ cm}^{-1}$ y $851,93\text{ cm}^{-1}$, respectivamente y con menor intensidad en la guanábana ($854,08\text{ cm}^{-1}$). (Schulz & Baranska, 2007) identificaron otros picos relacionados con azúcares en zanahorias ($1462, 1126, 840\text{ cm}^{-1}$); todos estos picos se identificaron en estas frutas tropicales con diferentes intensidades (Figura 1).

Las asignaciones de las moléculas de vibración asociadas a los azúcares presentes en las frutas tropicales se realizaron de acuerdo con la bibliografía publicada (Anexo1). La glucosa es una de las hexosas más comunes con aldehídos en su estructura (Wiercigroch et al., 2017), que contiene el grupo carbonilo (tramo C-O) (Zheng et al., 2023). Este azúcar se encontró a $1131,22\text{ cm}^{-1}$, $1134,44\text{ cm}^{-1}$ y $1133,37\text{ cm}^{-1}$; en chirimoya, guanábana y piña, respectivamente. La fructosa, también conocida como "azúcar de la fruta", se encuentra en frutas y plantas en estado libre y como componente básico de la sacarosa (Wiercigroch et al., 2017).

Las bandas Raman a $1472- 1454\text{ cm}^{-1}$, asignadas a vibraciones de tijera CH_2 (Yao et al.,2020), contienen picos a $1464,22\text{ cm}^{-1}$, $1467,44\text{ cm}^{-1}$ y $1464,22\text{ cm}^{-1}$ en chirimoya, guanábana y piña, respectivamente, sin embargo, el pico correspondiente a la vibración $\beta(\text{CCO})$ de la fructosa estaba ausente en la guanábana.

El PCA es un método quimiométrico que nos permite explorar patrones (Brereton,

2007) y casi siempre es el primer análisis que se realiza en un conjunto de datos multivariantes (Esbensen & Geladi, 2020). Este conjunto de datos espectrales adquiridos puede estar perturbado por ruido aleatorio durante la adquisición, por

lo que es necesario algún método de preprocesamiento para mejorar los resultados del PCA. Los métodos de preprocesamiento pueden reducir el ruido aleatorio y mejorar las características espectrales de interés (Roger et al., 2020) en la figura 2 muestra los resultados de los cuatro métodos de preprocesamiento aplicados al conjunto de datos espectrales de chirimoya, guanábana y piña. La primera, segunda y tercera derivadas de los métodos de preprocesamiento Savitzky-Golay (Figura 3b, 3c y 3d) produjeron cambios más visibles en los espectros corregidos que el método de centrado medio (Figura 3a); estos cambios se observan en las intensidades y posiciones de los picos.

Los cambios en los indicadores de rendimiento del modelo se presentan para destacar el efecto de los métodos de preprocesamiento (Roger et al., 2020) Este efecto puede observarse en la Tabla 1, que destaca que cuando se utilizó el método pre procesamiento de la primera derivada SG, el modelo PCA estaba compuesto por cuatro componentes principales que capturaban el 92,59% de la varianza total de los datos y el 7,41% de los residuos Q (todos los resultados en la Tabla 4). (Mata et al., 2022) utilizaron el gráfico T2 vs. Q residuales de Hotellingp para eliminar cuatro espectros identificados como valores atípicos entre la discriminación de semillas de algodón transgénico y convencional.

La Figura 4, (obtenida tras eliminar dos valores atípicos) muestra que la chirimoya tiende a separarse de los otros frutos con los cuatro métodos de preprocesamiento. Sin embargo, en ninguno de ellos se convirtió en un valor atípico, ya que como máximo alcanza el 95%.

El método de preprocesamiento centrado en la media produjo un modelo PCA de tres componentes con una varianza capturada del 76,05%, que es inferior a las varianzas de los otros modelos (Tabla 1). En el gráfico de puntuación, se puede observar una mejor separación de las muestras debido a la formación de tres conglomerados bien definidos en la (Figura 5a). La chirimoya y la guanábana, que pertenecen a la familia Annonaceae (Padmanabhan & Paliyath, 2016), forman conglomerados más cercanos entre sí porque comparten muchos picos Raman (incluidos los azúcares), por lo que su composición química es similar, a diferencia de la piña, que pertenece a otra familia (Bromeliaceae) y tiene una

composición química diferente. La separación de los conglomerados puede deberse a las diferencias en el contenido de compuestos fitoquímicos de las frutas, como polifenoles, vitaminas, fibra y carotenoides. El diagrama de carga del primer componente principal producido por los cuatro métodos de preprocesamiento (Figura 3) muestra picos más pronunciados en la banda de 1000 a 1200 cm^{-1} , la región donde se encuentra el pico característico de la glucosa (común en las tres frutas tropicales).

4.1. Análisis discriminante de mínimos cuadrados parciales

Puesto que se desconoce el poder discriminativo de un modelo de clasificación, es necesario analizarlo utilizando diferentes métodos de preprocesamiento (Devos et al.,

2014). La Tabla 2 muestra los resultados del modelo PLS-DA aplicado a frutas tropicales con los cuatro métodos de preprocesamiento estudiados (todos los resultados están en la Tabla 5).

El centrado medio y la primera derivada de los métodos de preprocesamiento SG muestran los mejores resultados de predicción, cuya precisión es del 100% en todas las frutas tropicales. En el conjunto de datos de entrenamiento, la precisión fue del

93,06-100% y del 98,68 - 100%, para el centrado medio y la primera derivada del método de preprocesamiento SG, respectivamente. Con la segunda y tercera derivadas de los métodos de preprocesamiento SG, la precisión fue del 80-100% y del 84,44-

100% en los conjuntos de datos de predicción y entrenamiento, respectivamente. Estos valores son superiores a los comunicados por (Kolašinac et al., 2022), cuya precisión fue del 19,35-100% en los datos de entrenamiento para la clasificación de cinco variedades de pimentón de los Balcanes; estos resultados variaron debido al método de preprocesamiento aplicado.

Además, en el estudio de clasificación de canales de carne mediante espectroscopia Raman, (Logan et al., 2022) descubrieron que el mejor modelo

PLS-DA clasificó correctamente el 94% de las canales alimentadas con pasto frente a las alimentadas con grano.

Según la Tabla 2, el método de preprocesamiento SG primera derivada produjo los mejores resultados en el modelo de clasificación PLS-DA para el conjunto de datos de entrenamiento, ya que clasifica correctamente las muestras en un 98,68-100% (P), las muestras que pertenecen a su clase en un 97,43-100% (SE) y las muestras que no pertenecen a su clase en un 98,66-100% (SP). Todos los indicadores del conjunto de datos de predicción fueron del 100%.

También analizamos el poder de clasificación del modelo PLS-DA mediante las curvas Receiver Operating Characteristic (ROC) (Figura 6); en este caso, las curvas ROC de la chirimoya, la guanábana y la piña se situaron más cerca de la esquina superior izquierda del espacio ROC, lo que indica que el método de preprocesamiento de la primera derivada SG produce un modelo PLS-DA con un rendimiento óptimo, ya que puede clasificar correctamente las frutas tropicales en la clase a la que pertenecen. El área bajo la curva (AUC) confirma este resultado con valores de 1 para todas las frutas tropicales.

V. CONCLUSIONES

En este estudio se utilizó la espectroscopia confocal Raman y PLS-DA nos permitió establecer un modelo de clasificación de alta precisión para discriminar las tres frutas tropicales ampliamente consumidas en Perú.

Dado que estas frutas tropicales como la (guanábana, chirimoya y piña) que pertenecen a la familia Annonaceae forman conglomerados más cercanos entre sí porque comparten muchos picos Raman (incluidos los azúcares), tales como la (glucosa, fructosa y sacarosa) por lo que su composición química es similar, a diferencia de la piña, que pertenece a otra familia (Bromeliaceae) y tiene una composición química diferente.

Los resultados obtenidos muestran que la glucosa estuvo presente con mayor intensidad en la chirimoya y la piña a $855,15\text{ cm}^{-1}$ y $851,93\text{ cm}^{-1}$ y con menor intensidad en la guanábana ($854,08\text{ cm}^{-1}$). Mientras que la sacarosa se encontró en los picos de $1131,22\text{ cm}^{-1}$, $1134,44\text{ cm}^{-1}$ y $1133,37\text{ cm}^{-1}$; en chirimoya, guanábana y piña. Mientras que la fructosa estuvo presente en los picos de $1464,22\text{ cm}^{-1}$, $1467,44\text{ cm}^{-1}$ y $1464,22\text{ cm}^{-1}$ en chirimoya, guanábana y piña.

VI. RECOMENDACIONES

Recomendamos realizar más estudios para corroborar nuestros hallazgos.

Recomendamos hacer más investigaciones con el equipo Raman, ya que en los resultados obtenidos demostraron que en la banda de $800-900\text{ cm}^{-1}$ y en la banda $1100-1200\text{ cm}^{-1}$ obtuvieron mayor presencia de glucosa.

VII. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Agu, K. C., & Okolie, P. N. (2017). Proximate composition, phytochemical analysis, and in vitro antioxidant potentials of extracts of *Annona muricata* (Soursop). *Food Science & Nutrition*, 5(5), 1029-1036.
<https://doi.org/10.1002/fsn3.498>
- Banerjee, S., Ranganathan, V., Patti, A., & Arora, A. (2018). Valorisation of pineapple wastes for food and therapeutic applications. *Trends in Food Science & Technology*, 82, 60-70.
<https://doi.org/10.1016/j.tifs.2018.09.024>
- Berumen-Varela, G., Hernández-Oñate, M. A., & Tiznado-Hernández, M. E. (2019). Utilization of biotechnological tools in soursop (*Annona muricata* L.). *Scientia Horticulturae*, 245, 269-273.
<https://doi.org/10.1016/j.scienta.2018.10.028>
- Brereton, R. G. (2007). *Applied Chemometrics for Scientists*. John Wiley & Sons.
- Devos, O., Downey, G., & Duponchel, L. (2014). Simultaneous data pre-processing and SVM classification model selection based on a parallel genetic algorithm applied to spectroscopic data of olive oils. *Food Chemistry*, 148, 124-130.
<https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2013.10.020>
- Dorey, E., Fournier, P., Léchaudel, M., & Tixier, P. (2016). Modeling sugar content of pineapple under agro-climatic conditions on Reunion Island. *European Journal of Agronomy*, 73, 64-72.
<https://doi.org/10.1016/j.eja.2015.10.010>
- Esbensen, K., & Geladi, P. (2020). Principal Component Analysis: Concept, Geometrical Interpretation, Mathematical Background, Algorithms, History,

Practice. In *Comprehensive Chemometrics: Chemical and Biochemical Data Analysis*: (Secon, vol. 02 pp. 4-14). Elsevier.

Isas, A. S., Mariotti Celis, M. S., Pérez Correa, J. R., Fuentes, E., Rodríguez, L., Palomo, I., Mozzi, F., & Van Nieuwenhove, C. (2020). Functional fermented cherimoya (*Annona cherimola* Mill.) juice using autochthonous lactic acid bacteria. *Food Research International*, 138, 109729. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2020.109729>.

Kniese, J., Race, A. M., & Schmidt, H. (2021). Classification of cereal flour species using Raman spectroscopy in combination with spectra quality control and multivariate statistical analysis. *Journal of Cereal Science*, 101, 103299. <https://doi.org/10.1016/j.jcs.2021.103299>

Kolašinac, S., Pećinar, I., Danojević, D., & Stevanović, Z. D. (2022). Raman spectroscopy coupled with chemometric modeling approaches for authentication of different paprika varieties at physiological maturity. *LWT*, 162, 113402. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2022.113402>.

Li, W., Tan, F., Cui, J., & Ma, B. (2022). Fast identification of soybean varieties using Raman spectroscopy. *Vibrational Spectroscopy*, 123, 103447. <https://doi.org/10.1016/j.vibspec.2022.103447>

Logan, B. G., Hopkins, D. L., Schmidtke, L. M., & Fowler, S. M. (2022). Assessing chemometric models developed using Raman spectroscopy and fatty acid data for Northern and Southern Australian beef production systems. *Meat Science*, 187, 108753. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2022.108753>

Lopes Leivas, C., Moro Cantu-Jungles, T., Barbosa da Luz, B., Fernanda de Paula Werner, M., Iacomini, M., & M. C. Cordeiro, L. (2023). Investigation of the chemical structure and analgesic and anti-inflammatory properties of

polysaccharides that constitute the dietary fibers of soursop (*Annona muricata*) fruit. *Food Research International*, 166, 112588.

<https://doi.org/10.1016/j.foodres.2023.112588>

Mata, M. M. da, Rocha, P. D., Farias, I. K. T. de, Silva, J. L. B. da, Medeiros: E. P., Silva, C. S., & Simões, S. da S. (2022). Distinguishing cotton seed genotypes by means of vibrational spectroscopic methods (NIR and Raman) and chemometrics. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 266,

120399. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2021.120399>

Mohan, K., Muralisankar, T., Uthayakumar, V., Chandirasekar, R., Revathi, N., Ramu Ganesan, A., Velmurugan, K., Sathishkumar, P., Jayakumar, R., & Seedeivi, P. (2020). Trends in the extraction, purification, characterisation and biological activities of polysaccharides from tropical and sub-tropical fruits – A comprehensive review. *Carbohydrate Polymers*, 238, 116185. <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2020.116185>.

Monarres-Cuevas, O., Alia-Tejagal, I., Pérez-Arias, G. A., López-Martínez, V., Juárez- Lopez, P., Valle-Guadarrama, S., & Rodríguez-Verastegui, L. L. (2022). Physical, chemical, and physiological characterization of chilling injury in soursop fruit (*Annona muricata* L.). *Postharvest Biology and Technology*, 193,

112052.

<https://doi.org/10.1016/j.postharvbio.2022.112052>

Nakajima, S., Kuroki, S., & Ikehata, A. (2023). Selective detection of starch in banana fruit with Raman spectroscopy. *Food Chemistry*, 401, 134166.

<https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2022.134166>

Padmanabhan, P., & Paliyath, G. (2016). Annonaceous Fruits. En *Encyclopedia of Food and Health* (pp. 169-173).

<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-384947-2.00031-3>.

- Perrone, A., Yousefi, S., Salami, A., Papini, A., & Martinelli, F. (2022). Botanical, genetic, phytochemical and pharmaceutical aspects of *Annona cherimola* Mill. *Scientia Horticulturae*, 296, 110896.
<https://doi.org/10.1016/j.scienta.2022.110896>.
- Roger, J. M., Boulet, J. C., Zeaiter, M., & Rutledge, D. N. (2020). Preprocessing Methods. In *Comprehensive chemometrics: Chemical and biochemical data analysis: Vol. (Second, Vol.3)*. Elsevier.
- Schulz, H., & Baranska, M. (2007). Identification and quantification of valuable plant substances by IR and Raman spectroscopy. *Vibrational Spectroscopy*, 43(1), 13-25.
<https://doi.org/10.1016/j.vibspec.2006.06.001>
- Wiercigroch, E., Szafraniec, E., Czamara, K., Pacia, M. Z., Majzner, K., Kochan, K., Kaczor, A., Baranska, M., & Malek, K. (2017a). Raman and infrared spectroscopy of carbohydrates: A review. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 185, 317-335.
<https://doi.org/10.1016/j.saa.2017.05.045>
- Wu, L., Tang, X., Wu, T., Zeng, W., Zhu, X., Hu, B., & Zhang, S. (2023). A review on current progress of Raman-based techniques in food safety: From normal Raman spectroscopy to SESORS. *Food Research International*, 169, 112944.
<https://doi.org/10.1016/j.foodres.2023.112944>
- Yao, X., Fu, C., Zhang, S., Cheng, L., & Jiang, Z. (2020b). Structure investigation of β -D-fructose crystal under high pressure: Raman scattering, IR absorption, and synchrotron X-ray diffraction. *Journal of Molecular Structure*, 1220, 128746. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.128746>
- Yazgan Karacaglar, N., Bulat, T., Boyaci, I. H., & Topcu, A. (2019) Raman spectroscopy coupled with chemometric methods for the discrimination of

foreign fats and oils in cream and yogurt. *Journal of Food and Drug Analysis*, 27(1), 101-110.

<https://doi.org/10.1016/j.jfda.2018.06.008>

Zheng, Z., Yao, X., Zhang, S., Fang, L., & Jiang, Z. (2023). In-situ Raman study of α -D-glucose under different pressure and temperature. *Journal of Molecular Structure*, 1274, 134539.

<https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2022.134539>

Zhou, D., Liu, Q., Wu, C., Li, T., & Tu, K. (2021). Characterization of soluble sugars, glycosidically bound and free volatiles in fresh-cut pineapple stored at different temperature. *Food Bioscience*, 43, 101329.

<https://doi.org/10.1016/j.fbio.2021.10132>

ANEXOS

Tabla 1.

Efecto de cuatro métodos de preprocesamiento de datos en el modelo PCA para chirimoya, guanábana y piña.

Preprocessing method	PC	RMSECV	% Variance Captured Total	Q residual	Hotelling's T ²
Mean centering	3	254.18	76.05	23.95	76.05
First Savitzky-Golay derivative	4	44.06	92.59	7.41	92.59
Second Savitzky-Golay derivative	5	25.86	91.10	8.90	91.10
Third Savitzky-Golay derivative	5	39.32	81.06	18.94	81.06

Tabla 2.

Resultados de clasificación del modelo PLS-DA.

Pre-processing method	Sweet fruit	Training data set			Prediction data set		
		P (%)	SE (%)	SP (%)	P (%)	SE (%)	SP (%)
Mean centering	Chirimoya	93.06	93.87	97.98	100.00	100.00	100.00
	Soursop	97.02	97.95	96.97	100.00	100.00	100.00
	Pineapple	100.00	98.00	100.00	100.00	100.00	100.00
First Savitzky-Golay derivative	Chirimoya	100.00	97.43	100.00	100.00	100.00	100.00
	Soursop	98.68	100.00	98.66	100.00	100.00	100.00
	Pineapple	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00
Second Savitzky-Golay derivative	Chirimoya	96.68	54.83	98.11	100.00	12.50	100.00
	Soursop	84.44	92.00	83.05	80.00	100.00	75.00
	Pineapple	100.00	89.28	100.00	100.00	100.00	100.00
Third Savitzky-Golay derivative	Chirimoya	98.13	71.79	98.61	100.00	20.00	100.00
	Soursop	87.94	97.22	86.67	80.59	69.23	83.33
	Pineapple	98.68	100.00	98.67	100.00	100.00	100.00

Precisión (P), Sensibilidad (SE) o tasa de verdaderos positivos, Especificidad (SP) o tasa de verdaderos negativos.

Tabla 3.

Asignaciones de picos Raman para patrones de azúcar y chirimoya (Annona cherimola), guanábana (Annona muricata L.), piña (Ananas comosus L. Merr).

Assignment	Literature	Fructose	Glucose	Sucrose	Chirimoya (<i>Annona cherimola</i>)	Soursop (<i>Annona muricata</i> L.)	Pineapple (<i>Ananas comosus</i> L. Merr)
$\delta(\text{CH}_2)$	1460 (Wiercigroch et al., 2017)	1473.93	1471.74	1472.81	1464.22	1467.44	1464.22
$\rho(\text{CH}_2)$	1346 (Wiercigroch et al., 2017)	1356.80	1359.73	1355.73	1355.73	1352.50	1353.58
$\nu(\text{CC}), \nu(\text{CO}), \beta(\text{COH})$	1142 (Wiercigroch et al., 2017)	1133.37	1133.37	1133.37	1131.22	1134.44	1133.37
$\nu(\text{CC}), \nu(\text{CO})$	1074 (Wiercigroch et al., 2017)	1080.73	1081.81	1080.73	1078.58	1085.03	1085.03
CH, COH bending	924 (Zheng et al., 2023)	932.49	929.27	933.57	928.20	928.20	918.53
$\nu(\text{CH})$	867 (Zheng et al., 2023)	859.45	853.00	860.52	855.15	854.08	851.93
$\beta(\text{CCO})$	596 (Yao et al., 2020)	594.12		595.20	601.64		595.12
$\beta(\text{CCO}), \beta(\text{CCC})$	527 (Yao et al., 2020)	536.12		537.19	536.12	535.04	535.04
$\beta(\text{CCC})$	465 (Yao et al., 2020)	456.63	455.55	457.70	453.40	455.55	455.55
$\beta(\text{CCC}), \beta(\text{CCO}), \beta(\text{OCO})$	424 (Zheng et al., 2023)	416.88	415.81	416.88	417.95		

Tabla 4.*Resultados del modelo PCA con distintos métodos de preprocesamiento.*

Pre-processing methods	RMSEC	RMSECV	Principal component number	Eigenvalue of Cov(X)	% Variance captured this PC	% Variance captured total
Mean centering	180.47	254.18	1	1.29e+07	39.29	39.29
			2	6.36e+06	19.34	58.64
			3	5.72e+06	17.42	76.05
First Savitzky-Golay derivative method	31.30	44.06	1	2.17e+06	68.52	68.52
			2	3.81e+05	12.02	80.54
			3	2.75e+05	8.66	89.20
			4	1.08e+05	3.39	92.59
Second Savitzky-Golay derivative method	19.20	25.86	1	5.47e+05	54.96	54.96
			2	1.90e+05	19.06	74.01
			3	8.61e+04	8.65	82.67
			4	4.62e+04	4.65	87.31
			5	3.77e+04	3.79	91.10
Third Savitzky-Golay derivative method	29.15	39.31	1	5.12e+05	47.57	47.57
			2	1.72e+05	15.96	63.53
			3	8.88e+04	8.24	71.77
			4	6.25e+04	5.80	77.57
			5	3.75e+04	3.48	81.06

Tabla 5.*Resultado del modelo PLS-DA con diferentes métodos de preprocesamiento.*

Pre-processing method	Modeled Class	Cherimoya	Soursop	Pineapple
Mean centering	Sensitivity (Cal)	0.959	1.000	1.000
	Specificity (Cal)	0.929	0.949	1.000
	Sensitivity (CV)	0.939	1.000	1.000
	Specificity (CV)	0.909	0.949	1.000
	Class. Err (Cal)	0.0557617	0.0252525	0
	Class. Err (CV)	0.0760668	0.0252525	0
	RMSEC	0.31426	0.273395	0.217022
	RMSECV	0.333692	0.289513	0.229203
	Bias	1.66533e-16	1.66533e-16	1.11022e-16
	CV Bias	0.00127205	-0.00184987	0.000577824
	R ² Cal	0.554066	0.662499	0.78946
	R ² CV	0.501205	0.622938	0.766066
First Savitzky-Golay derivative method	Sensitivity (Cal)	0.974	1.000	1.000
	Specificity (Cal)	0.972	0.987	1.000
	Sensitivity (CV)	0.897	0.972	1.000
	Specificity (CV)	0.958	0.987	1.000
	Class. Err (Cal)	0.0267094	0.00666667	0
	Class. Err (CV)	0.0721154	0.0205556	0
	RMSEC	0.26207	0.197014	0.198749
	RMSECV	0.311281	0.252941	0.209272
	Bias	-0.00915475	0.00408662	0.00506812
	CV Bias	0.00775709	-0.0145767	0.00681962
	R ² Cal	0.699008	0.822952	0.819861
	R ² CV	0.595265	0.717618	0.800737
Second Savitzky-Golay derivative method	Sensitivity (Cal)	0.548	1.000	0.964
	Specificity (Cal)	0.906	0.831	1.000
	Sensitivity (CV)	0.548	0.960	0.929
	Specificity (CV)	0.887	0.831	1.000
	Class. Err (Cal)	0.272976	0.0847458	0.0178571
	Class. Err (CV)	0.28241	0.104746	0.0357143
	RMSEC	0.397685	0.343363	0.242586
	RMSECV	0.400828	0.351006	0.244279
	Bias	0.0964188	-0.131557	0.0351384
	CV Bias	0.0958097	-0.13477	0.0389599
	R ² Cal	0.366397	0.538207	0.740784
	R ² CV	0.356427	0.518102	0.740114
Third Savitzky-Golay derivative method	Sensitivity (Cal)	0.821	0.944	1.000
	Specificity (Cal)	0.889	0.813	0.987
	Sensitivity (CV)	0.821	0.917	1.000
	Specificity (CV)	0.875	0.813	0.973
	Class. Err (Cal)	0.145299	0.121111	0.00666667
	Class. Err (CV)	0.152244	0.135	0.0133333
	RMSEC	0.348922	0.32159	0.208805
	RMSECV	0.361874	0.336387	0.234444
	Bias	-0.00584702	0.000421702	0.00542532
	CV Bias	-0.00528552	-0.00200115	0.00728667
	R ² Cal	0.465947	0.528059	0.801175
	R ² CV	0.425925	0.486149	0.749947

Figura 7. *Frutos dulces (Guanábana, Chirimoya Piña).*

Soursop



Chirimoya



Pineapple



Figura 8. Cortado de frutos Dulces (Guanábana, Chirimoya y Piña).



Figura 9. Liofilización de las muestras de frutos dulces (Guanábana, Chirimoya, Piña).

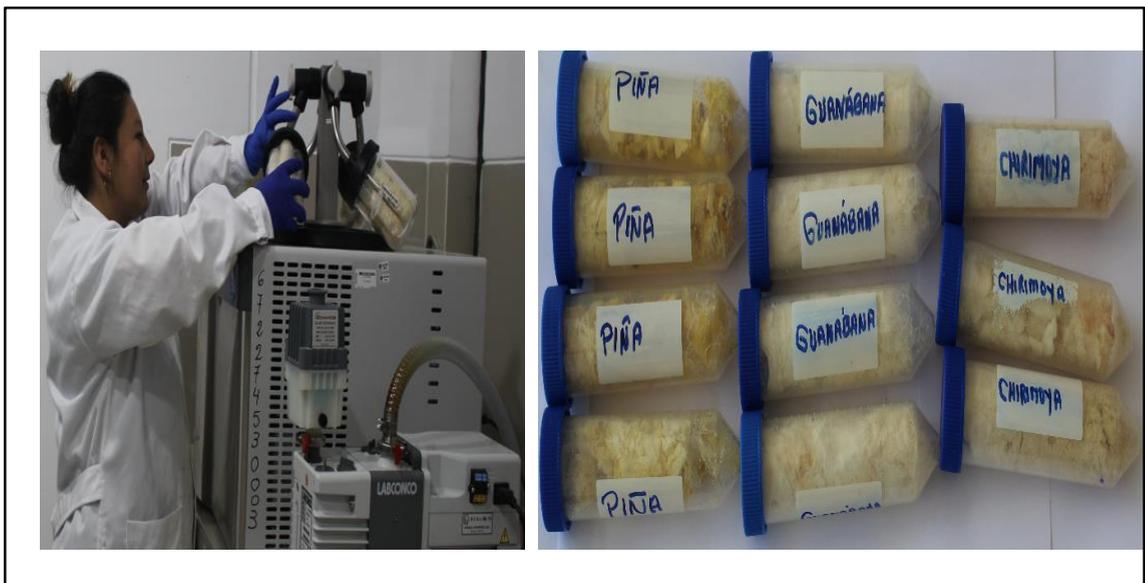


Figura 10. Análisis de las muestras por Espectroscopia confocal Raman.

