

Estudio sobre el potencial de la técnica NIR como estrategia para determinar la calidad bromatológica de la carne de pollo comercial

Julián David Suárez Castañeda y María Camila Arguello Uribe

Trabajo de grado para optar por el título de Ingeniería Química
Modalidad presencial

Director

Luis Javier López Giraldo

Doctor en Bioquímica, química y ciencia de alimentos.

Codirector

Carlos Jesús Muvdi Nova

Doctor en Ingeniería de Procesos

Universidad Industrial de Santander
Facultad de Ingeniería Físicoquímicas
Escuela de Ingeniería Química
Bucaramanga

2025

Dedicatoria

Quisiera dedicar este logro y cada logro de mi vida a las dos personas más especiales para mí, aquellas que son mi inspiración, mis motivos de ser y de hacer cada día de mi vida. Las amo.

A mi madre, Adriana Uribe Muñoz.

Quiero agradecerle por el esfuerzo hecho cada día en ser la increíble madre que es, por darme todo su apoyo en mis estudios, en el deporte y en la vida en sí, por todo lo que me has enseñado y por demostrarme con el ejemplo a lo que se debe aspirar de alguien determinado y admirable, mi madre que lo es todo para mí, que todo lo hace con amor y por quienes ama.

A mi abuela, Esperanza Muñoz Amaya.

Quien toda mi vida ha sido mi apoyo y mi impulso, la que cada día con sus infinitas acciones me demuestra su amor y me hace querer ser mejor, la primera en preguntarme como me fue en cada parcial, en cada exposición y en cada día; la primera en rezar por mí cada día y cada noche, no me alcanzaría la vida para agradecerle todo lo que ella ha hecho por mi cuidándome y amándome.

Finalmente me gustaría agradecer a las personas especiales de mi vida. Mi familia: mis hermanas Paula y Alejandra, mis primos Sebastián, Santiago y Fernanda, mis tías Marta, Cristina, Ana y Lucy y mis tíos Libardo, Fredy y Luis. Así como la familia que la vida me ha dado, Samy y Celeste. Gracias por ser parte de mí y de quien soy.

A todo aquel que me ha amado y escuchado.

María Camila Arguello Uribe.

Dedicatoria

Este logro va dedicado a mi padre Gustavo Adolfo Suárez, mi madre Ana Lucía Castañeda; a mis tías Angela María del consuelo Birke, Luz Amparo Benichou, Gloria Patricia; y a mi tío Helmonth de Jesús, que a pesar de tan grande distancia geográfica, siempre he contado con su apoyo emocional durante gran parte de mi vida universitaria.

Sin embargo, me gustaría dedicarlo principalmente a una persona que siempre ha estado conmigo, una persona que ha tenido presente el gran esfuerzo hecho por mí, que a pesar de las dificultades emocionales y personales que he atravesado, ha podido entenderme, ayudarme y soportarme sin juicios de por medio. Gracias Julián Suárez por ser como eres, por hacerme quien soy, por nunca rendirse pese a tener una personalidad difícil de llevar para las demás personas, por pensar más allá de lo común y obtener en su mayoría todo lo que siempre he querido; gracias por permitirme obtener este título, gracias por hacerme sentir orgulloso de mi mismo, y por querer llevar mi nombre y apellido hasta lo más alto posible desde que soy consciente de mi propia existencia.

Julián David Suárez Castañeda.

Agradecimientos

Queremos agradecer a la Universidad Industrial de Santander, a nuestro director de tesis Luis Javier López Giraldo, a nuestro codirector Carlos Jesús Muvdi Nova, al Grupo de Investigación en Ciencia y Tecnología en Alimentos (CICTA).

Por ser parte de nuestra formación académica y profesional, por su compromiso con nuestro proyecto de investigación, por el tiempo e interés dedicado en nuestro proceso de aprendizaje.

Muchas gracias.

Tabla de contenido

Introducción	11
1. Objetivos.....	13
1.1. Objetivo general.....	13
1.2. Objetivos específicos	13
2. Marco conceptual	13
2.1. Instrumentación.....	16
2.1.1. Modos de lectura	16
2.2. Calibración.....	18
2.2.1. Pretratamiento de espectros.....	18
2.2.1.1. Multiplicative Scatter Correction (MSC)	19
2.2.2. Calibración PLS	19
2.2.2.1. Número de factores.....	21
2.3. Rendimiento de los modelos de predicción.	22
3. Estado del arte	23
4. Metodología.....	25
4.1. Fase 1	26
4.1.1. Preparación de las muestras y del equipo.....	26
4.1.2. Realización de las lecturas de calibración.....	28
4.1.3. Recolección de datos y ajuste de modelo de calibración	30
4.2. Fase 2	30
4.2.1. Realización de lecturas de predicción	30
5. Resultados.....	31
5.1. Espectros obtenidos por el quipo NIR	31
5.2. Número óptimo de factores PLS.....	34
5.3. Datos de calibración y validación cruzada.....	36
5.4. Datos de predicción.....	38
6. Conclusiones.....	42
7. Recomendaciones	43
Referencias bibliográficas.....	44
Apéndices.....	47

Lista de Tablas

Tabla 1. Ecuaciones para el cálculo del rendimiento de los modelos.....	22
Tabla 2. Aplicaciones industriales y semi-industriales de la técnica NIR en la industria alimentaria.	23
Tabla 3. Métodos utilizados para análisis bromatológicos.	26
Tabla 4. Lote de muestras para calibración.....	27
Tabla 5. Rango de valores por propiedad para cada sección de pollo	27
Tabla 6. Resultados de calibración pernil mixto.....	37
Tabla 7. Resultados validación cruzada pernil mixto	37
Tabla 8. Métricas de predicción modelo PLS software The Unscrambler X	38
Tabla 9. Métricas de predicción modelo PLS equipo ProxiMate®.	39
Tabla 10. Estadísticas de RPD para alimentos.....	41

Lista de figuras

Figura 1. Espectro electromagnético.	14
Figura 2. Bandas de absorción vistas en el NIR	15
Figura 3. Configuración esquemática de un instrumento NIR	16
Figura 4. Variación del error de predicción respecto al número de factores.	21
Figura 5. Equipo ProxiMate®	25
Figura 6. Diagrama metodológico	25
Figura 7. Muestra blanca de sulfato de sodio.	28
Figura 8. Muestra homogenizada de pollo.....	29
Figura 9. Soporte magnético.....	29
Figura 10. Espectro pernil mixto y pechuga de pollo	31
Figura 11. Espectros sin tratamiento MSC de las muestras de calibración de pernil mixto.....	32
Figura 12. Espectros con tratamiento MSC de las muestras de calibración de pernil mixto.....	33
Figura 13. RMSECV vs Número de factores PLS para pernil mixto	34
Figura 14. RMSECV vs Número de factores PLS con MSC para pernil mixto	36
Figura 15. Datos predichos vs datos de referencia The Unscrambler X.....	39
Figura 16. Datos predichos vs datos de referencia equipo ProxiMate®.....	40

Lista de apéndices

Apéndice A. Espectros sin tratamiento MSC para las muestras de calibración de pechuga de pollo	47
Apéndice B. Espectros con tratamiento MSC para las muestras de calibración de pechuga de pollo	47
Apéndice C. Comportamiento RMSECV respecto al número de factores PLS para la propiedad de proteína de pechuga de pollo.....	48
Apéndice D. Comportamiento RMSECV respecto al número de factores PLS para la propiedad de grasa de pechuga de pollo.	48
Apéndice E. Comportamiento RMSECV respecto al número de factores PLS para la propiedad de humedad de pechuga de pollo.....	49
Apéndice F. Comportamiento del RMSECV respecto al número de factores para cenizas de las muestras de pechuga de pollo	49
Apéndice G. Resultados de calibración de las muestras de pechuga de pollo.....	50
Apéndice H. Resultados de validación cruzada de las muestras de pechuga de pollo	50

Resumen

Título: Estudio sobre el potencial de la técnica NIR como estrategia para determinar la calidad bromatológica de la carne de pollo comercial.*

Autor: Julián David Suarez Castañeda, María Camila Arguello Uribe.**

Palabras clave: Espectroscopía, NIR, PLS, *The Unscrambler X*, pollo, bromatología

Descripción: En este estudio se evaluó la capacidad de entrenamiento y predicción del equipo Proximate® para ser utilizado como herramienta de control de calidad bromatológica de cárnicos avícolas en la industria de alimentos mediante la técnica de espectroscopía NIR (*Near-Infrared Spectroscopy*) como alternativa a los métodos tradicionales de química húmeda, que son lentos y destructivos. Las muestras utilizadas, junto con los valores de referencia de los parámetros de calidad de interés (proteína, grasa, humedad y ceniza) fueron obtenidos a través del Grupo de Investigación en Ciencia y Tecnología en Alimentos (CICTA). Se entrenó el equipo, se desarrollaron dos modelos de calibración comparables: uno realizado manualmente mediante el *software* externo *The Unscrambler X* en el que se realizó un pretratamiento a los datos espectrales mediante *Multiplicative Scatter Correction* (MSC), que mostró buena capacidad de predicción mediante *Partial Least Squares* (PLS), y otro generado directamente por el equipo ProxiMate®, con menor desempeño debido al reducido número de muestras para calibración.

Finalmente, para determinar la capacidad predictiva del equipo se realizaron lecturas a muestras independientes de la calibración, obteniendo así valores de *Determination coefficient* (R^2) de 0,85; 0,88; 0,86 y 0,68; *Root mean square error in prediction* (RMSEP) de 1,045; 1,667; 1,230 y 0,225 y *Ratio of prediction to deviation* RPD 2,306; 2,144; 2,150 y 1,469 para proteína, grasa, humedad y ceniza respectivamente. El equipo, según el parámetro de confiabilidad RPD presentó un modelo predictivo aplicable. Sin embargo, el modelo del *software* evidencia mayor potencial de la técnica NIR como apoyo para el control bromatológico con la incorporación de nuevas muestras al equipo que fortalezcan el modelo, mejorando la precisión y confiabilidad según la métrica RPD.

* Trabajo de grado

** Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería química. Director: Luis Javier Lopez Giraldo, Ph.D en Bioquímica, Química y tecnología de alimentos, Ingeniero Químico. Codirector: Carlos Jesus Muvdi Nova, Ph.D en en ingeniería de procesos, Ingeniero químico.

Abstract

Título: Study on the potential of the NIR technique as a strategy to determine the bromatological quality of commercial chicken meat.²

Autor: Julián David Suarez Castañeda, María Camila Arguello Uribe.^{3*}

Palabras clave: Spectroscopy, NIR, PLS, *The Unscrambler X*, chicken, bromatological

Descripción: This study evaluated the training and prediction capability of the Proximate® device for use as a tool in bromatological quality control of poultry meat products in the food industry through Near-Infrared Spectroscopy (NIR) as an alternative to traditional wet chemistry methods, which are slow and destructive. The samples, along with reference values for quality parameters of interest (protein, fat, moisture, and ash), were provided by the Food Science and Technology Research Group (CICTA). The device was trained, and two comparable calibration models were developed: one manually created using external software *The Unscrambler X*, where spectral data were preprocessed by Multiplicative Scatter Correction (MSC) and Partial Least Squares (PLS) regression demonstrated good prediction capability; and another generated directly by the Proximate® device, which showed lower performance due to a limited number of calibration samples.

Finally, to determine the predictive ability of the device, independent samples outside the calibration set were tested, yielding coefficients of determination (R^2) of 0.85, 0.88, 0.86, and 0.68; root mean square errors of prediction (RMSEP) of 1.045, 1.667, 1.230, and 0.225; and ratios of prediction to deviation (RPD) of 2.306, 2.144, 2.150, and 1.469 for protein, fat, moisture, and ash, respectively. According to the RPD reliability parameter, the device produced an applicable predictive model. However, the software-generated model demonstrates greater potential of the NIR technique as support for bromatological control with the incorporation of additional samples to strengthen the model, improving precision and reliability according to the RPD metric.

* Trabajo de grado

** Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería química. Director: Luis Javier Lopez Giraldo, Ph.D en Bioquímica, Química y tecnología de alimentos, Ingeniero Químico. Codirector: Carlos Jesus Muvdi Nova, Ph.D en en ingeniería de procesos, Ingeniero químico.

Introducción

La industria de alimentos se rige bajo el artículo 5 de la Resolución 1506 del 2011 exigiendo así comercializar sus productos con un etiquetado específico que les permita a los consumidores identificar el contenido nutricional del producto, dentro de estas exigencias, la industria avícola cuenta con una tabla nutricional específica para la producción y comercialización de carne de pollo, regida por la Resolución 402 del 2002. Por lo anterior, estas industrias deben realizar un control de calidad estricto en sus procesos, asegurando así el cumplimiento de las resoluciones mencionadas anteriormente. Para ello se apoyan de laboratorios que mediante diferentes técnicas de caracterización fisicoquímica les permita conocer el contenido nutricional de sus productos y verificar así si cumplen con la normativa establecida. Dentro de estos laboratorios, el grupo CICTA UIS con su Laboratorio de Alimentos se ha destacado en este campo, determinando las características bromatológicas, químicas y funcionales de productos alimentarios, entre ellos, los cárnicos avícolas. Sin embargo, el método tradicional de caracterización bromatológica, que se ha estado utilizado (química húmeda), presenta desventajas considerables como destrucción de la muestra, tiempos de espera altos y; especialmente, la generación de residuos contaminantes que implica un gasto adicional en el tratamiento de éstos.

El presente estudio evalúa una alternativa a los métodos clásicos de caracterización fisicoquímica que le permitirá al grupo disminuir las desventajas mencionadas por medio de la utilización del equipo ProxiMate®, un instrumento que usa la tecnología Near-infrared spectroscopy y Ultraviolet-visible spectroscopy (NIR y VIS), la cual permite predecir los parámetros de calidad bromatológica; usando métodos como *Partial Least Squares* (PLS) para correlacionar los datos espectrales con las mediciones bromatológicas usando química húmeda.

Por ende, la implementación de esta técnica ofrecería una mayor flexibilidad y rapidez a la hora de determinar los parámetros bromatológicos de una muestra, pues al reducir tiempos de análisis, los resultados otorgados a los productores pueden ser obtenidos de una forma más ágil, lo que beneficia la toma de mejores decisiones a la hora de comercializar el producto.

1. Objetivos

1.1. Objetivo general

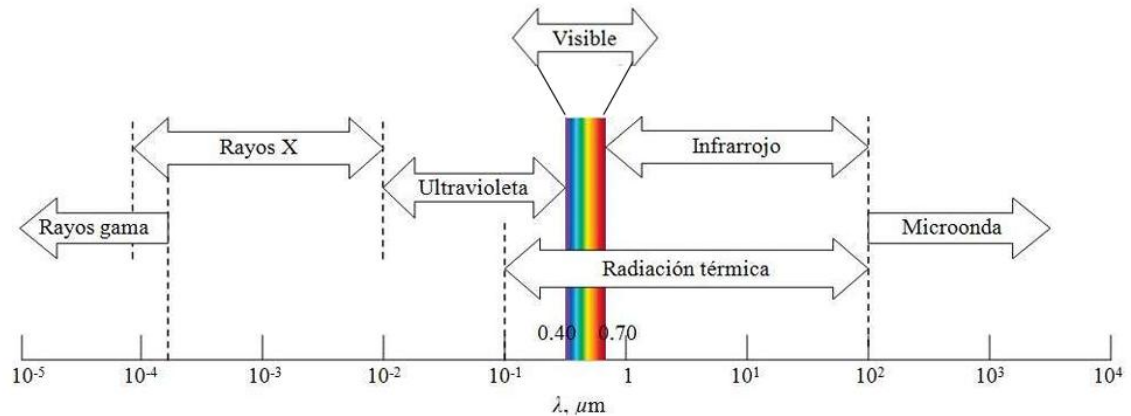
Evaluar el potencial de la técnica NIR como una estrategia de determinación de la calidad bromatológica en la carne de pollo comercial.

1.2. Objetivos específicos

- Desarrollar una matriz predictiva que vincule los datos NIR con los parámetros de calidad establecidos a través de la calibración.
- Determinar la capacidad predictiva de los modelos desarrollados mediante la comparación de los resultados obtenidos con análisis estándar de laboratorio.

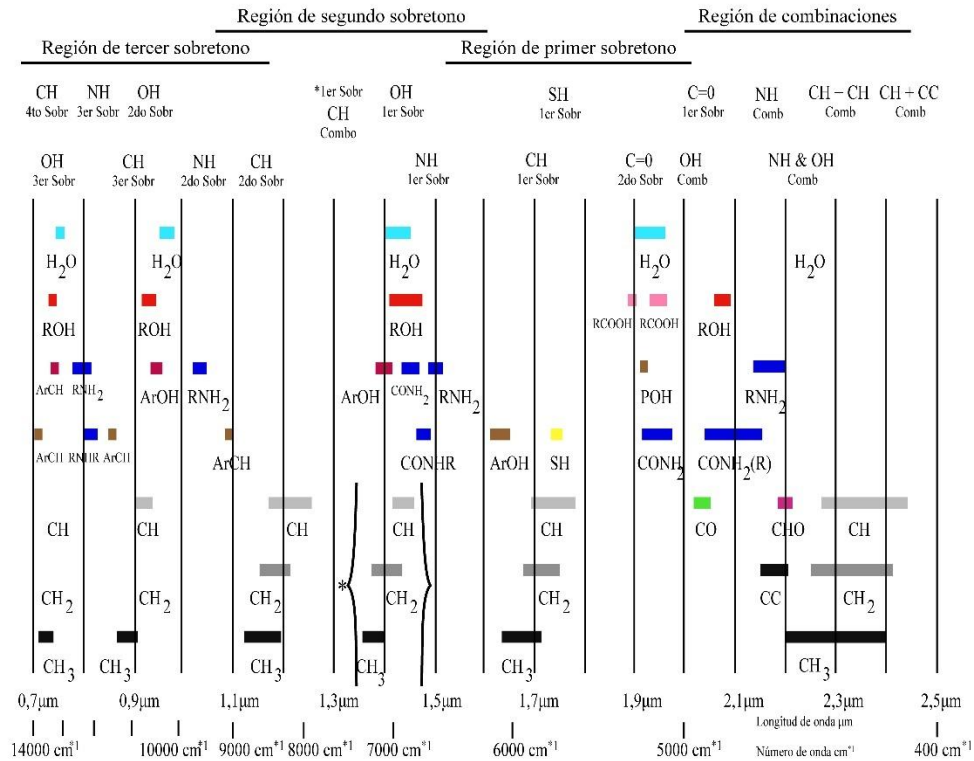
2. Marco conceptual

La tecnología NIR es una técnica de análisis espectroscópica que trabaja en la zona del espectro electromagnético (ver Figura 1) del infrarrojo cercano ($750 - 2500 \text{ nm}$) empleando energía fotónica con un rango que va desde los $2,65 \times 10^{-19} \text{ J}$ hasta los $7,96 \times 10^{-20} \text{ J}$. Este rango de energía es superior a la necesaria para promover las moléculas solo a sus estados vibracionales más bajos (a través de una transición vibracional fundamental), y es más baja que los valores típicos necesarios para la excitación de los electrones en las moléculas (exceptuando algunos compuestos de las tierras raras). Con lo anterior, el concepto se basa en la interacción intermolecular de la materia con la radiación electromagnética, dando como resultado la absorción y/o reflexión, provocando cambios en la intensidad de esta. El espectro resultante se puede utilizar para identificar y cuantificar los componentes de la muestra analizada (Pasquini, 2003).

Figura 1.*Espectro electromagnético.*

Nota. Adaptado de (Mondragón Cortez, 2017)

Existe una condición necesaria para que la interacción entre un haz de energía infrarroja produzca una vibración en una molécula al incidir sobre ella, y es la presencia de momentos dipolares. Si este momento dipolar es nulo, no hay absorción de energía infrarroja (Mondragón Cortez, 2017). Una molécula absorbe radiación infrarroja cuando experimenta un cambio neto en el momento dipolar, resultado de sus movimientos de vibración o rotación. Este fenómeno permite que el campo eléctrico de la radiación interactúe con el campo eléctrico generado por la fluctuación del momento dipolar de la molécula. Si la frecuencia de radiación iguala a la frecuencia de vibración natural de la molécula, ocurre una transferencia neta de energía que da lugar a un cambio en la amplitud de la vibración molecular y como consecuencia se absorbe la radiación (Peguero Gutiérrez, 2010). Gracias a esto, se tienen aplicaciones casi universales para moléculas que contienen enlaces $C - H$, $O - H$, $N - H$ y $S - H$. Philip J Harris y Clemens M. Altaner presentan las bandas de absorción que son vistas en la región del NIR (ver Figura 2).

Figura 2.*Bandas de absorción vistas en el NIR*

Nota. Adaptado de (Harris et al., 2013)

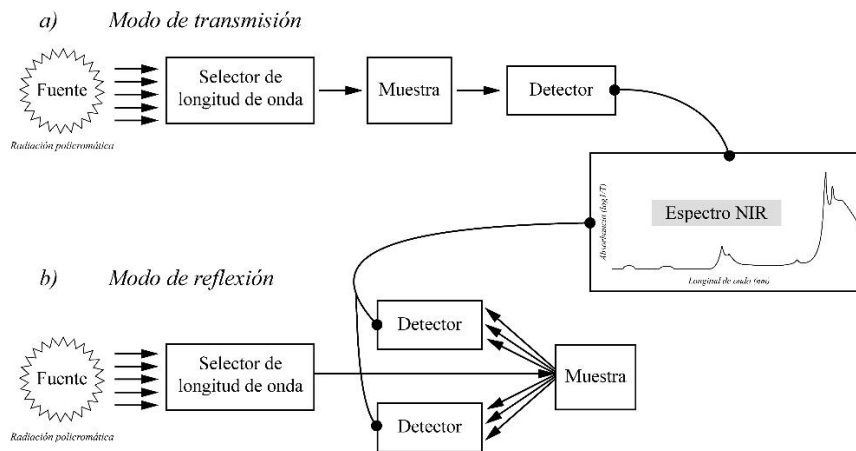
Estos fenómenos e interacciones, hace que la espectroscopía NIR sea una técnica no destructiva, rápida y rentable que permite aplicaciones *at-line* (uso de instrumento instalado muy cerca de la línea de proceso), *on-line* (investigación no directamente en el flujo de producción, sino con un circuito de recirculación), *in-line* (investigación de muestras con una interfaz directa del instrumento a la línea de producción) u *off-line* (análisis de muestras tomadas de forma discontinua en un laboratorio remoto), haciéndolo adecuada para el control de calidad, y el monitoreo de procesos en aplicaciones industriales (Porep et al., 2015).

2.1. Instrumentación

Los espectrómetros están conformados generalmente por una fuente de radiación, una cámara de iluminación de la muestra, un mon cromador, y un sistema de detección/registro del espectro. Comúnmente los espectrómetros usados en la agroindustria cuentan con dos métodos de lectura que vendrían siendo modo de reflexión y transmisión (ver Figura 3).

Figura 3.

Configuración esquemática de un instrumento NIR



Nota. Adaptado de (Baeten et al., 2002)

2.1.1. Modos de lectura

Para una mezcla con composición conocida, el análisis cuantitativo en modo transmitancia se puede llevar a cabo midiendo la absorción de luz en las bandas espectrales específicas de cada componente. En general, las bandas clave suelen ser aquellas que exhiben una intensidad significativa y están libres de superposición espectral con las bandas de absorción de los demás componentes presentes en la mezcla. La ley fundamental que relaciona la concentración de una

sustancia con la intensidad de absorción a una determinada frecuencia es la conocida ley de Lambert-Beer que suele expresarse de la siguiente manera.

$$D(\nu) = \log \frac{I_0(\nu)}{I(\nu)} = \varepsilon(\nu) * b * c \quad (\text{Ec. 1})$$

Donde $D(\nu)$ es la absorbancia, $I_0(\nu)$ e $I(\nu)$ son las intensidades de la radiación infrarroja de frecuencia ν incidente y transmitida respectivamente, $\varepsilon(\nu)$ es el coeficiente de absorción molar, b es el camino óptico y c es la concentración. La hipótesis fundamental en la que se basa el análisis cuantitativo de una mezcla de varios componentes es la aditividad de la absorbancia, es decir que la absorbancia de una disolución de varias sustancias es la suma de la absorbancia individual de cada una de ellas (Morcillo Rubio, 1981), por lo tanto, de la Ec. 1 podemos expresar lo siguiente.

$$D(\nu) = \sum_{i=1}^n \varepsilon_i(\nu) * b * c_i \quad (\text{Ec. 2})$$

Los materiales no translucidos se pueden analizar mediante reflexión difusa. La penetración de la luz NIR está limitada por el material de la muestra; interactúa con ella, se refracta y se refleja de manera difusa en el sensor (ver Figura 3 b). Por lo tanto, una expresión empleada con mucha frecuencia es una aplicación empírica de la relación entre la concentración y la reflectancia relativa, similar a la ley de Lambert-Beer (Peguro Gutiérrez, 2010)

$$A = \log \frac{1}{R} = a' * c \quad (\text{Ec. 3})$$

Donde A es la absorbancia aparente, R la reflectancia relativa que se define como el cociente entre la reflectancia de la muestra ($R_{muestra}$) entre la reflectancia de una muestra blanca como referencia ($R_{referencia}$), a' la constante de proporcionalidad, y c la concentración.

2.2. Calibración

Los métodos de calibración multivariante resultan ser los más adecuados al trabajar con espectrómetros NIR, ya que su introducción permitió superar las dificultades que anteriormente presentaba esta técnica (tales como bandas anchas, débiles, inespecíficas y con una amplia superposición). Estos enfoques de calibración asumen una relación lineal entre los parámetros medidos de la muestra y la intensidad de sus bandas de absorción; con *partial least squares* (PLS) las pequeñas desviaciones de la linealidad también son aceptables, ya que pueden suprimirse fácilmente mediante la inclusión de componentes principales adicionales en el modelo de calibración (Blanco et al., 2000).

2.2.1. Pretratamiento de espectros

En la espectroscopia NIR se analizan matrices complejas, no solo por la elevada cantidad de absorciones registradas a distintas longitudes de onda, sino también debido a la complejidad inherente en la interpretación de los espectros resultantes, la cual, se ve dificultada por la superposición y la interacción de múltiples bandas espectrales. Es por eso, que los datos se someten a un procesamiento fundamental que sirve para atenuar o eliminar la no linealidad presente entre las variables dependientes-explicativas, las interferencias, atenuar el ruido aleatorio relacionado con las condiciones experimentales y el ruido electrónico de medición del equipo (Bouhzam, 2020). Los pretratamientos más conocidos son el *Standard Normal Variate* (SNV), *Detrending* (DT), *Multiplicative Scatter Correction* (MSC), derivadas y promedio de espectros (Gaitán, 2009).

2.2.1.1. **Multiplicative Scatter Correction (MSC).** La corrección por Dispersión Multiplicativa (MSC) es una técnica que permite corregir simultáneamente los efectos aditivos y multiplicativos en un espectro. Su fundamento se basa en que la radiación dispersa exhibe una dependencia espectral distinta respecto a la absorción lumínica causada por los compuestos químicos presentes. Por consiguiente, es posible utilizar datos correspondientes a diferentes longitudes de onda para discriminar entre la absorción de luz y la radiación dispersa. (Bouhzam, 2020). En otras palabras, se intenta eliminar los efectos multiplicativos y el desplazamiento constante; los coeficientes de corrección para cada uno de los espectros se calculan mediante una regresión por medio de mínimos cuadrados para que cada espectro de cada muestra se ajuste al espectro de muestra ideal (generalmente el espectro promedio) (Reyes, 2024).

La fórmula matemática para corregir el espectro original x_i se expresa como:

$$x_{MSC} = \frac{x_i - b}{a} \quad (\text{Ec. 4})$$

Donde a y b son los parámetros de la recta ajustada (pendiente e intercepto) resultado de la regresión lineal de mínimos cuadrados entre el espectro original (x_i) y el espectro de referencia (Javier, 2016).

2.2.2. *Calibración PLS*

Es un método de proyección que modela la relación entre la matriz de respuesta Y y la matriz de predicción X (Trygg et al., 1998). A diferencia de una regresión en componentes principales (PCR) en PLS las matrices X y Y se descomponen simultáneamente en sus matrices de *scores* y *loadings* tal como se muestra a continuación.

$$X = TP^T + E \quad (\text{Ec. 5})$$

$$Y = UC^T + F \quad (\text{Ec. 6})$$

Donde T y U son las matrices de *scores*, P y C son las matrices *loadings*, y E y F son las matrices residuales de X y Y respectivamente. Uno de los métodos que se pueden emplear para descomponer las matrices originales es el algoritmo de iteración conocido como NIPALS; mediante esta iteración, se obtienen la matriz de regresión (Ec. 7) definiendo así la recta de calibración (Ec. 8), lo que posibilita la predicción de las propiedades de interés al analizar los nuevos espectros (García Uceda, 2020).

$$B = W(P^T W)^{-1} Q^T \quad (\text{Ec. 7})$$

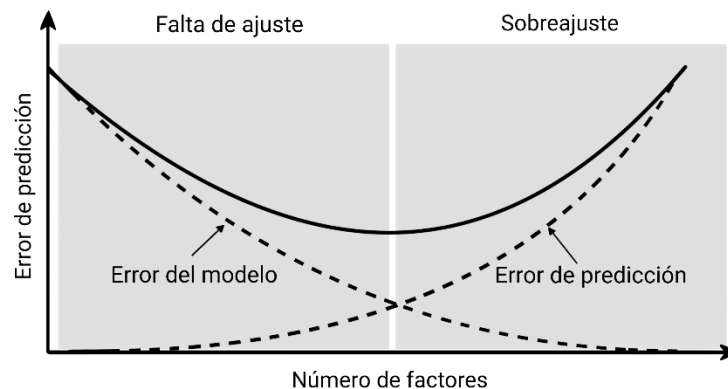
$$Y = XB \quad (\text{Ec. 8})$$

Donde W es la matriz de pesos de los *loadings*, que representa la relación entre X e Y . Dentro del algoritmo NIPALS se escoge un número de factores/componentes (A), el cual establece la dimensión de las matrices de *scores* y *loadings* de las matrices de predicción y de respuesta; el número de factores definirá la eficiencia y robustez del modelo de calibración.

2.2.2.1. Número de factores. Al aumentar el número de factores PLS, el modelo se ajusta mejor a las muestras del conjunto de calibración, explicando con mayor precisión y reduciendo así el error de calibración. Sin embargo, esto puede resultar en un modelo a medida únicamente a estas muestras, limitando su efectividad al tratar de predecir nuevas muestras cuyos espectros no estén dentro de la matriz de calibración. Por otro lado, si se emplean pocos factores PLS y no se captura toda la variabilidad presente en la información, la capacidad predictiva del modelo se ve afectada negativamente. (García Uceda, 2020). La figura 4 presenta cómo varía el error de predicción según el número de factores. El número óptimo de factores en el modelo PLS es aquel donde la curva alcanza su mínimo. No obstante, cuando este mínimo no es tan claro como en la figura vista, se considera óptimo el número de factores en el que el error de predicción deja de disminuir y se estabiliza.

Figura 4.

Variación del error de predicción respecto al número de factores.



Nota. Adaptado de (García Uceda, 2020)

2.3. Rendimiento de los modelos de predicción.

Después de desarrollar el modelo de calibración, resulta imprescindible realizar una validación predictiva utilizando muestras independientes que no hayan sido empleadas durante la fase de calibración, con el fin de evaluar su capacidad de generalización y desempeño con datos que no se usaron para el entrenamiento del modelo; para tal propósito se usan diferentes descriptores, algunos de ellos se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1.

Ecuaciones para el cálculo del rendimiento de los modelos

Parámetro	Ecuación	Rango	Número de ecuación	Referencia
Determination coefficient	$R_x^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y'_i - \bar{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2}$	0-1 siendo 0 no correlación, y 1 correlación lineal	(Ec. 9)	(Porep et al., 2015)
Root mean square error in calibration	$RMSEC = \sqrt{\frac{\sum (y'_i - y_i)^2}{n - A - 1}}$		(Ec. 10)	
Root mean square error in cross-validation	$RMSECV = \sqrt{\frac{\sum (y'_i - y_i)^2}{n}}$	Valores bajos, indican una mejor habilidad de predicción	(Ec. 11)	(Teixeira Badaró, 2021)
Root mean square error in prediction	$RMSEP = \sqrt{\frac{\sum (y'_i - y_i)^2}{n_{val}}}$		(Ec. 12)	
Ratio of prediction to deviation	$RPD = \frac{SD}{RMSEP \text{ o } RMSECV}$	Valores altos indican una mejor predicción	(Ec.13)	

y'_i = Valores predichos, y_i = Valores de referencia, n = Número de muestras, n_{val} = Número de muestras externas para predicción, A = Número de factores usados en el modelo, SD = Standard deviation, x : c – calibración; cv – validación cruzada; p – predicción.

Nota. Adaptado de (Teixeira Badaró, 2021)

3. Estado del arte

La industria alimentaria ha usado la espectroscopía de infrarrojo cercano (NIR), desde los años 60 para determinar diversos constituyentes alimentarios, como grasa, azúcares, proteínas y humedad. El análisis de estos constituyentes se ha realizado tanto para matrices cárnicas como vegetales y ha ganado mucha popularidad porque la técnica es rápida y no destructiva (Osborne, 2006).

Es evidente que la técnica NIR se ha usado principalmente para el conocimiento composicional de alimentos sólidos y líquidos. Sin embargo, en los últimos años se han presentado estudios que dejan en evidencia como esta técnica se ha consolidado en las estrategias de control de calidad dentro de la línea de producción. Prado Marrón usó la tecnología VIS-NIR para predecir la calidad microbiológica mediante el recuento de aerobios mesófilos y enterobacterias (Prado Marrón et al., n.d.), demostrando como la aplicabilidad de esta técnica no se limita solamente a la determinación composicional, aunque sea su aplicación más conocida.

Durante la última década, la técnica NIR se ha usado eficazmente para el análisis de productos complejos como los cárnicos, lo que ha ratificado como una técnica capaz de correlacionar los espectros adquiridos con métodos de referencia tradicionales, generando así modelos robustos de alta capacidad de predicción, gracias al adecuado pretratamiento de datos espectrales (Miguel et al., 2024). Asimismo, el desarrollo de algoritmos de aprendizaje automatizado y técnicas de validación cruzada buscan fortalecer los modelos predictivos y hacer frente a los desafíos que presenta la implementación de esta técnica ante la heterogeneidad y complejidad de la matriz de los cárnicos avícolas. Esta tecnología está en constante evolución como se puede evidenciar con algunos trabajos de investigación presentados en la Tabla 2.

Tabla 2.*Aplicaciones industriales y semi-industriales de la técnica NIR en la industria alimentaria.*

Tipo de muestra	Equipo	Método de regresión/análisis	Calibración y validación	Constituyente analizado	Fuente
Pollo	LABSPEC, ASD	PLS	$R^2 > 0,8$ $R^2 > 0,99$ $ETC = 0,52$ $RER = 10,6$	Calidad microbiológica, actividad de agua, pH	(Prado Marrón et al., n.d.)
	-	PLS	$R^2 = 0,97$ $RMSEC = 0,229$	Grasa, proteína, agua, pH	(Liao et al., 2010)
Cerdo	LabSpec 5000	PLS-DA SIMCA LDA	-	Calidad de la carne (porcentaje de cerdo ibérico en el producto y alimentación del animal)	(Tejerina et al., 2021)
Vaca	-	PLS	$R^2 > 0,8$ $0,7 > RPD < 1,58$ $RPD = 1,75$	pH, WHC	(Prieto et al., n.d.)
Tenca (pescado)	LabSpec 2500	PLS-DA PLSR	$R^2 > 0,97$ $0,689 \leq R^2 \leq 0,804$ $SEC = 0,097$	MS, nitrógeno, proteínas, grasa, Dureza, antioxidantes, α -tocopherol, γ -tocopherol	(Ortiz et al., 2024)
Queso	Umbio AB	PLS	$R^2 = 0,696$ $SEC = 0,086$	Grasa, proteína, ácidos, actividad microbiológica, enzimas endógenas.	(Priyashantha et al., 2021)
Yogurt	MicroNIR TM Pro1700	PLS	$R^2 = 0,98$ $RMSEC = 0,06$ $LOD = 0,06$	Lactosa	(Folli et al., 2022)
Leche	MicroNIR TM Pro1700	PLS	$R^2 = 0,79$ $RMSEC = 0,08$ $LOD = 0,04$	Lactosa	(Folli et al., 2022)
Miel	MicroNIR TM Pro1700	PLS	$0,81 < R^2 < 0,98$ $RMSEC = 0,65$ $LOD = 0,32$	Adulterantes	(Folli et al., 2022)
Aceite de oliva extra virgen	MicroNIR TM Pro1700	PLS	$0,90 < R^2 < 0,97$ $2,7 < LOD < 4,4$	Adulterantes	(Folli et al., 2022)
Mango	Portable SCIO NIR spectrometer	SI-PLS	$R^2 = 0,63$ $1,25 < RPD < 1,8$	pH, sólidos solubles totales	(Lampete y et al., 2023)

WHC: Water holding capacity. MS: Materia seca. ETC: Error típico de calibración. RER: Ratio entre el rango de los datos y el error típico de validación cruzada. RMSEC: Root mean square error of calibration. RPD: Ratio of Performance to Deviation. SEC: Standard error of calibration. LOD: Limit of Detection.

4. Metodología

La presente metodología establece de forma sistemática los procedimientos empleados para evaluar el potencial de la espectroscopía de infrarrojo cercano (NIR) utilizando el equipo ProxiMate® (ver Figura 5) como estrategia para determinar la calidad bromatológica de la carne de pollo comercial.

Figura 5.

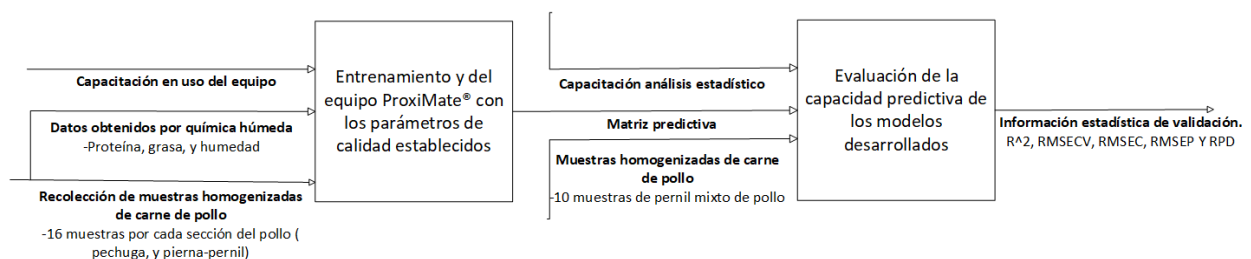
Equipo ProxiMate®



Se abarca cada fase, desde la preparación de las muestras hasta el análisis e interpretación de los datos obtenidos, este flujo de trabajo se sintetiza de forma visual en el siguiente diagrama metodológico.

Figura 6.

Diagrama metodológico



4.1.Fase 1

4.1.1. Preparación de las muestras y del equipo

Las muestras utilizadas en la fase de calibración y validación; así como los valores de referencia de los parámetros bromatológicos (ver Tabla 3), fueron suministrados por el laboratorio de alimentos CICTA.

Tabla 3.

Métodos utilizados para análisis bromatológicos.

Componente	Método
Grasa	Gravimetría / Análisis de grasa total en alimentos Código GOMEGC.01 V08 2024-02-23
Proteína	Volumetría Análisis de proteína en alimentos Código GOMEPL.01 10 2024-02-23
Humedad	Gravimetría / Análisis de humedad en alimentos Código GOMESL.01 V08 2024-02-21
Ceniza	Gravimetría / Análisis de ceniza en alimentos Código GOMECH.01 V11 2024-03-23

Las muestras fueron etiquetadas siguiendo el código establecido por el laboratorio, y se adicionó un sufijo para indicar el tipo de presa a la que corresponde, siendo B y C para pechuga y pernil respectivamente. En la Tabla 4 se muestra un ejemplo de cómo se realizó el registro de las muestras durante el estudio.

Tabla 4.*Lote de muestras para calibración.*

Parte del pollo	Muestra	Grasa [%]	Humedad [%]	Proteína [%]	Cenizas [%]
Pechuga	M0382-25 B	2,69	76,92	18,61	-
Pechuga	M0383-25 B	4,20	77,96	16,34	-
Pernil mixto	M0384-25 C	8,17	74,31	16,74	-
Pernil mixto	M0789-25 C	7,24	77,68	11,85	1,5
Pechuga	M0450-25 B	2,93	79,27	15,85	1,40
Pechuga	M0454-25 B	3,22	78,61	17,47	1,41
Pernil mixto	M0448-25 C	11,85	69,56	16,35	-
Pernil mixto	M0850-25 C	12,74	76,30	10,61	1,29

Aunque las muestras recibidas se sometían a un proceso de trituración mecánica en los métodos mencionados en la Tabla 3, algunas muestras se les realizó una segunda trituración con la finalidad de asegurar la homogeneidad requerida para obtener lecturas óptimas.

Se creó una aplicación en el equipo ProxiMate® para cada tipo de presa del estudio, en cada aplicación se establecieron las propiedades de medición (grasa, proteína, humedad y ceniza) y los rangos de lectura (ver Tabla 5).

Tabla 5.*Rango de valores por propiedad para cada sección de pollo*

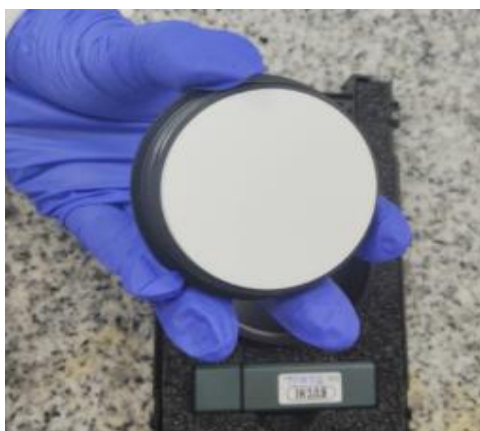
Tipo de presa	Rango	Humedad	Grasa	Proteína	Ceniza
Pechuga	Mínimo	70	1	14	0
	Máximo	83	17	24	2
Pernil mixto	Mínimo	65	3	8	0
	Máximo	80	13	18	2

Se realizó lectura a una muestra de referencia blanca de sulfato de sodio (N_2SO_4) (ver Figura 7) para estabilizar el equipo y obtener la reflectancia relativa R , esta lectura se repitió regularmente según fue solicitado por el equipo (aproximadamente cada semana).

Así mismo, en cada ocasión en que se utilizó el equipo, se efectuó una etapa de atemperamiento del equipo a 35°C, acompañada del precalentamiento de la lámpara.

Figura 7.

Muestra blanca de sulfato de sodio.



4.1.2. Realización de las lecturas de calibración

Con el equipo preparado, antes de cada lectura las muestras fueron descongeladas en baño maría a temperatura ambiente, y homogenizadas mediante trituración mecánica hasta alcanzar una consistencia similar a la mostrada en la Figura 8.

Figura 8.

Muestra homogenizada de pollo



Así mismo, el equipo cuenta con un soporte magnético (ver Figura 9) que permite girar la caja petri garantizando que la lectura se realice en diferentes puntos; los cuales serán promediados para generar un espectro consolidado.

Figura 9.

Soporte magnético



Cada lectura se realizó en la aplicación correspondiente al tipo de presa de la muestra, se inició la lectura y al finalizarla se registró según el código establecido. Posterior a la lectura se

ajustó la composición química de las propiedades a los valores de referencias correspondiente a la muestra para así formar la matriz de calibración.

4.1.3. Recolección de datos y ajuste de modelo de calibración

Se importaron los datos de la aplicación de cada tipo de presa, dichos datos corresponden a la información espectral, y datos bromatológicos de referencia de cada lectura realizada en la etapa de calibración, los cuales se cargaron en el programa *The Unscrambler X* donde se analizaron mediante un modelo de calibración PLS.

Debido a que el modelo del equipo es desconocido y por lo tanto considerado una caja negra. Se generó un modelo de calibración ajustable en *The Unscrambler X* para comparar su comportamiento ante la modificación de factores PLS.

4.2.Fase 2

4.2.1. Realización de lecturas de predicción

Durante el estudio, se almacenó un lote total de diez muestras independientes para predicción, donde nueve de este lote tenía información de la propiedad de cenizas. La preparación y lectura de estas muestras se realizó siguiendo el mismo procedimiento descrito desde la sección 4.1.2.

Para estudiar el potencial de la técnica NIR se evaluaron los parámetros R^2 , RPD y $RMSEP$ del modelo PLS ajustado manualmente en el software *The Unscrambler X* y el modelo del equipo ProxiMate®. Con estas métricas, se concluyó la capacidad predictiva del equipo y el potencial de la técnica NIR como estrategia de control de calidad bromatológico.

5. Resultados

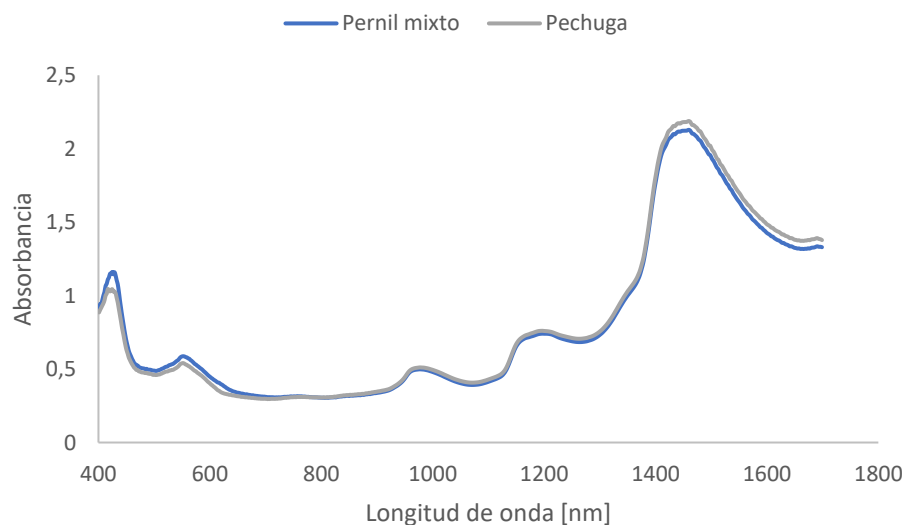
Por razones de espacio, se ejemplificarán las etapas de calibración y validación usando la información espectral obtenida para el pernil-mixto de pollo. Sin embargo, en los apéndices se presentan los gráficos, y tablas que se realizaron para la pechuga de pollo.

5.1. Espectros obtenidos por el equipo NIR

A continuación, en la Figura 10 se presentan los espectros correspondientes al pernil mixto (muestra M1931C) y pechuga (muestra M1935B), mostrando las características principales de la señal obtenida para cada una de las secciones de pollo.

Figura 10.

Espectro pernil mixto y pechuga de pollo



Si comparamos los espectros de la pechuga y pernil mixto de pollo, se visualizan picos muy parecidos en cada región de longitud de onda. Los picos en el rango de 1400nm a 1600nm representa la presencia de humedad libre, pues como se observó en la Figura 2, esta región

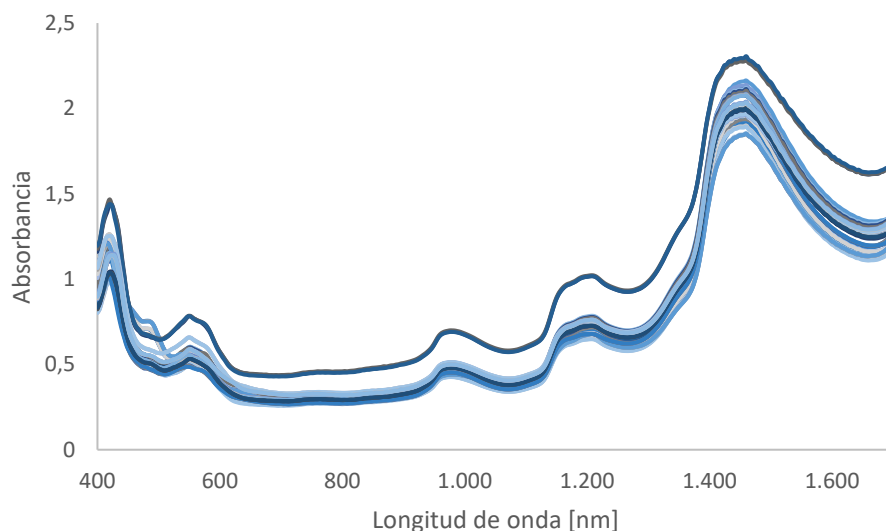
corresponde las bandas de absorción del primer sobretono $O - H$; entre $900nm$ y $1200nm$ pueden observarse señales asociadas con la grasa, debido a enlaces $C - H$; y, por último, se observa un pico significativo entre el rango $1400nm$ y $1700nm$ correspondientes a la proteína por las vibraciones $N - H$ y $C - H$ de los enlaces peptídicos.

Fuera de las diferencias no significativas en la absorbancia de ciertas longitudes de onda, no se presenta ninguna otra diferencia espectral entre las dos secciones de pollo.

Con las 16 muestras de calibración para el pernil mixto, se recopila la información espectral de cada una de ellas, y se almacena en una sola matriz para visualizar su comportamiento (ver Figura 11). Se usaron 16 muestras debido a que, hasta la fecha, eran las únicas disponibles para el estudio. Cabe resaltar que el equipo ProxiMate® permite la integración de nuevas muestras al modelo de calibración de forma continua, lo que facilitará la mejora y robustez del modelo a medida que se disponga de más datos en el futuro.

Figura 11.

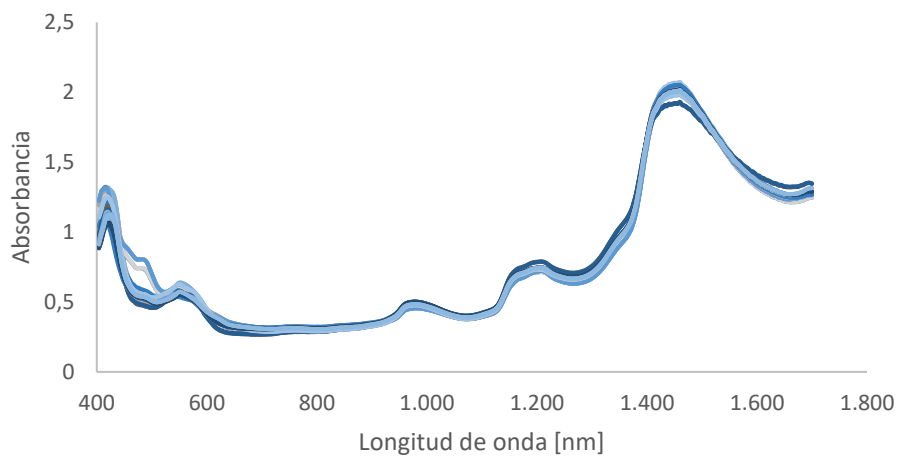
Espectros de las muestras de calibración de pernil mixto.



Las curvas presentadas en el conjunto de espectros de la Figura 11 mantienen formas similares y consistentemente alineadas, lo que indica cierta homogeneidad. Las variaciones entre los niveles de absorbancia sugieren diferencias en la composición de las propiedades de interés (proteína, grasa y humedad). Sin embargo, para evitar posibles influencias de variaciones físicas e incluso errores instrumentales al momento de registrar las señales de absorbancia, se aplica un tratamiento espectral. En la Figura 12, se presenta el mismo conjunto de espectros bajo el tratamiento matemático por MSC, esto con el objetivo de comparar la reducción de ruido innecesario.

Figura 12.

Espectros con tratamiento MSC de las muestras de calibración de pernil mixto.



Después de aplicar la corrección mediante MSC, en la Figura 12 se observa una mejora en la calidad de los espectros, los cuales presentan una mayor alineación y consistencia entre las muestras de calibración, reduciendo así las diferencias causadas por la dispersión de luz, o las diferencias instrumentales propias del equipo NIR; esto permite resaltar mejor la información

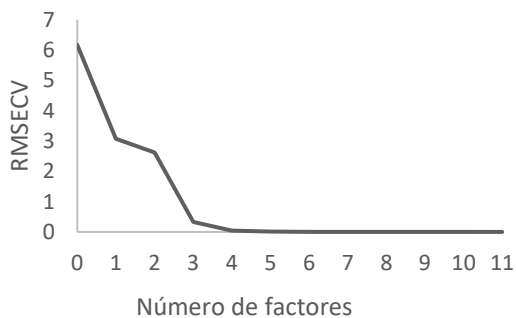
espectral, facilitando la identificación de patrones asociados con la composición química de las muestras. De esta manera, se espera que la información de la matriz X sea más representativa, e ideal para el modelo de predicción PLS.

5.2. Número óptimo de factores PLS

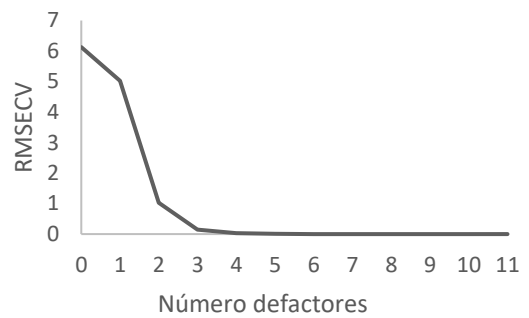
En la Figura 13 se presenta el cambio del RMSECV en función del número de factores empleados en el modelo PLS sin tratamiento MSC para cada propiedad analizada. Como se observa, el error disminuye de manera notable en las primeras iteraciones, y posteriormente este se estabiliza.

Figura 13.

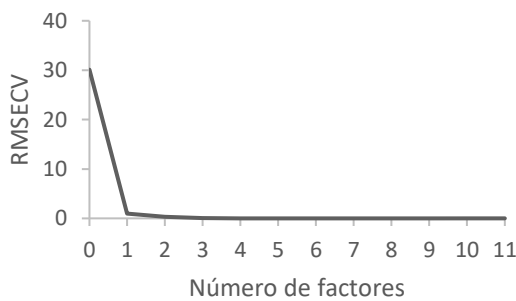
RMSECV vs Número de factores PLS para pernil mixto



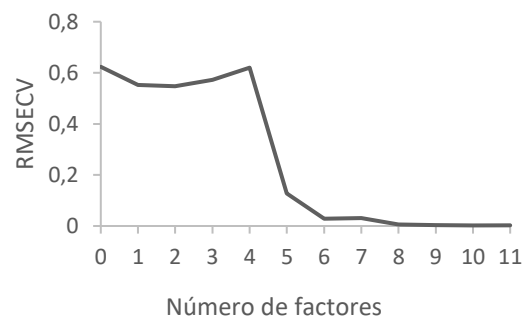
a) Proteína



b) Grasa



c) Humedad



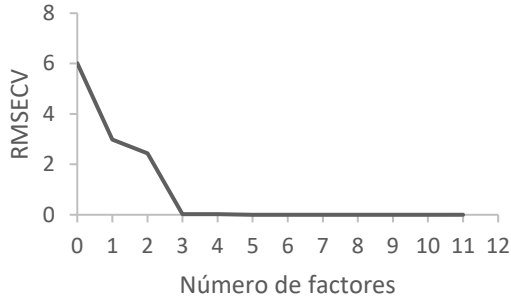
d) Cenizas

Para las tres primeras propiedades mostradas en la Figuras 13a, 13b, y 13c el número de factores óptimo se observa en el factor 4, pues en este factor el RMSECV se estabiliza; además la incorporación de más factores no contribuye de forma significativa a mejorar el modelo, sino que podría inducir al sobreajuste tal como se presentó en la Figura 4. Para la Figura 13d, se tiene un factor óptimo cercano al factor 8, duplicando el factor óptimo de las demás propiedades; esto porque dentro de las muestras totales pertenecientes al lote de calibración, solo el 56% de ellas tiene información sobre el contenido de cenizas, haciendo que la información perteneciente a esta propiedad sea escasa para construir una matriz completa.

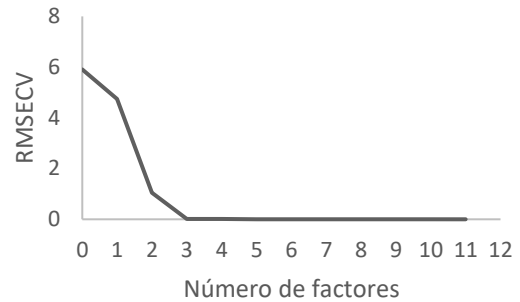
Como se observó en la Figura 12 la información espectral se mejoró cuando se usó el tratamiento MSC; por lo tanto, el número de factores PLS se redujo a 3 para las propiedades de proteína, grasa y humedad (Ver Figura 14a, 14b, y 14c respectivamente), y factor PLS 7 para la propiedad de cenizas (Ver Figura 14d).

Figura 14.

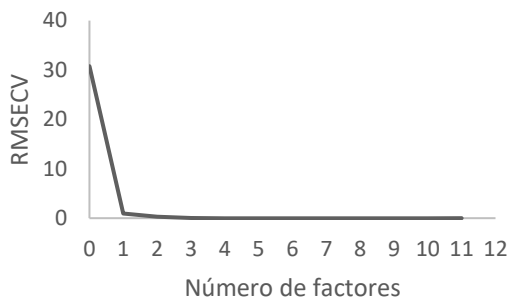
RMSECV vs Número de factores PLS con MSC para penil mixto



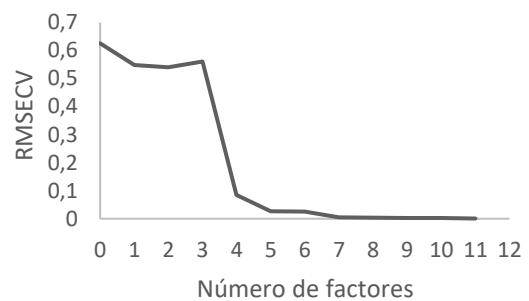
a) Proteína



b) Grasa



c) Humedad



d) Cenizas

5.3. Datos de calibración y validación cruzada

En la Tabla 6 y Tabla 7 se presentan los R^2 , $RMSEC$ y $RMSECV$ de las muestras de calibración, usando la información espectral sin tratamiento matemático y con tratamiento matemático MSC para 3 y 4 factores de PLS mediante el software *The Unscrambler X*. Para la validación cruzada, el programa escogió aleatoriamente 8 muestras dentro del conjunto de calibración.

Tabla 6.*Resultados de calibración pernil mixto*

Factor	Tratamiento	Proteína		Grasa		Humedad		Cenizas	
		R_c^2	RMSEC	R_c^2	RMSEC	R_c^2	RMSEC	R_c^2	RMSEC
3	Ninguno	0,997	0,29	0,99	0,11	0,99	0,035	0,269	0,523
	MSC	0,99	0,024	0,99	0,014	0,99	0,009	0,269	0,523
4	Ninguno	0,99	0,025	0,99	0,019	0,99	0,011	0,291	0,51
	MSC	0,99	0,021	0,99	0,005	1	0,0027	0,98	0,069

Tabla 7.*Resultados validación cruzada pernil mixto*

Factor	Tratamiento	Proteína		Grasa		Humedad		Cenizas	
		R_{cv}^2	RMSECV	R_{cv}^2	RMSECV	R_{cv}^2	RMSECV	R_{cv}^2	RMSECV
3	Ninguno	0,99	0,32	0,99	0,14	0,99	0,04	0,15	0,57
	MSC	0,99	0,029	0,99	0,018	0,99	0,01	0,19	0,56
4	Ninguno	0,99	0,04	0,99	0,02	0,99	0,014	0,01	0,6
	MSC	0,99	0,024	0,99	0,009	1	0,003	0,98	0,08

En la Tabla 6 y Tabla 7, si comparamos los factores 3 y 4, aunque se evidencia una disminución tanto del RMSEC y RMSECV para cada una de las propiedades analizadas, esta diferencia no es significativa para el modelo de calibración, por lo tanto, con el uso de un factor mayor a 3, puede haber riesgo de presentar sobreajuste del modelo al momento de leer las muestras del lote de predicción. De igual manera, con el pretratamiento MSC se presenta una disminución del RMSEC y RMSECV para cualquiera de los dos factores estudiados; esto puede indicar una calibración más robusta y precisa. Por lo anterior, las muestras de predicción fueron analizadas en el modelo PLS con pretratamiento MSC y un factor óptimo de 3.

5.4.Datos de predicción

En la Tabla 8 se presentan los R^2 y $RMSEP$ de las muestras de predicción analizadas por el software *The Unscrambler X* bajo el modelo PLS con un factor óptimo de 3.

Tabla 8.

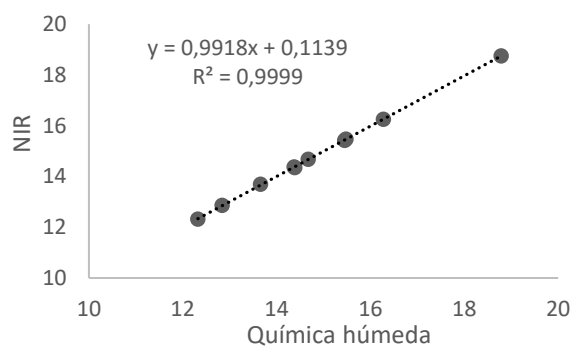
Métricas de predicción modelo PLS software The Unscrambler X

Propiedad	Muestras	Factor	Tratamiento	$RMSEP$	R_p^2
Proteína	10	3	MSC	0,02	0,99
Grasa	10	3	MSC	0,01	0,99
Humedad	10	3	MSC	0,006	1
Cenizas	9	3	MSC	0,24	0,18

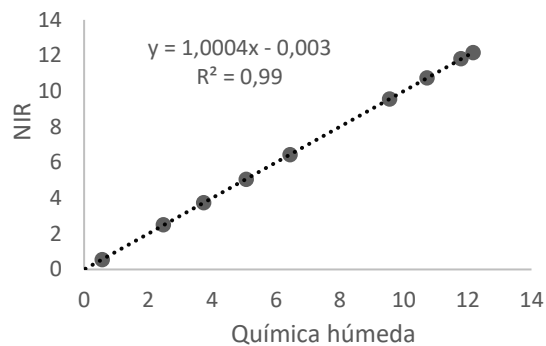
El modelo PLS del software *The Unscrambler X* presenta buena aceptación a muestras no usadas en el lote de calibración, pues los valores de $RMSEP$ son bajos incluso con un coeficiente de determinación lineal cercano a 1. Como se esperaba, la propiedad de ceniza da un error de predicción alto comparado con las demás propiedades, además no se tiene una tendencia lineal respecto a las muestras de predicción (ver Figura 15d) comparado con la proteína, grasa y humedad que sí presentan tendencia lineal (ver Figura 15a, 15b, y 15c respectivamente).

Figura 15.

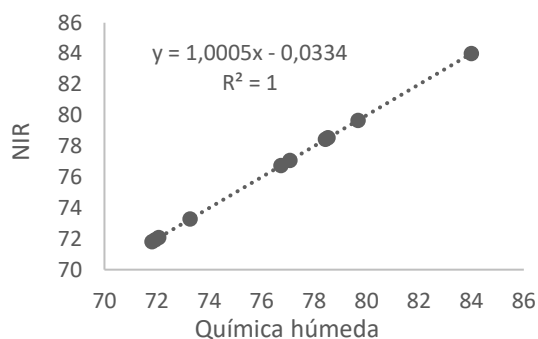
Datos predichos vs datos de referencia The Unscrambler X



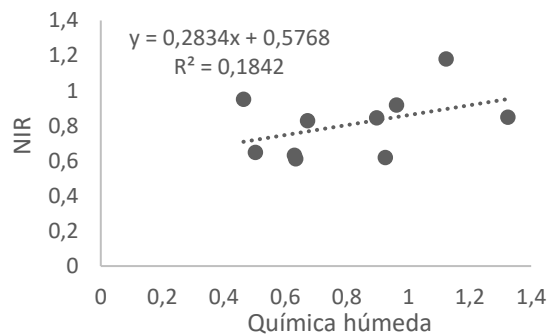
a) Proteína



b) Grasa



c) Humedad



d) Cenizas

En la Tabla 9 se presentan los R^2 , $RMSEP$, SD , y RPD de las muestras de predicción analizadas por el equipo ProxiMate® bajo su modelo PLS.

Tabla 9.

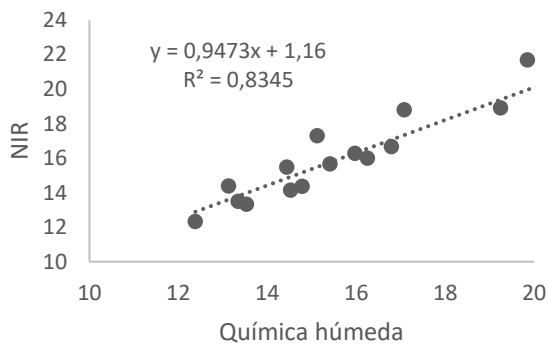
Métricas de predicción modelo PLS equipo ProxiMate®.

Propiedad	SD	$RMSEP$	R_p^2	RPD
Proteína	2,409	1,045	0,83	2,306
Grasa	3,574	1,667	0,76	2,144
Humedad	2,644	1,230	0,79	2,150
Cenizas	0,331	0,225	0,70	1,469

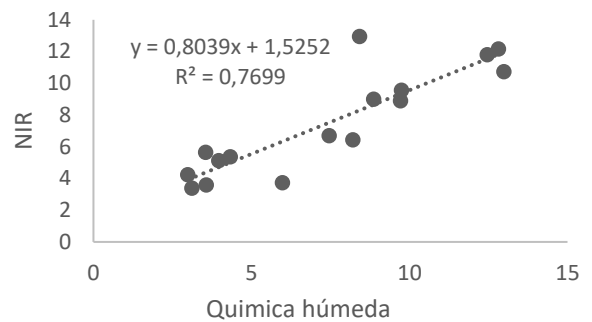
A diferencia de los resultados obtenidos por el software *The Unscrambler X*, los errores de predicción son mayores, indicando así una diferencia significativa entre los datos predichos por el equipo NIR y los datos de referencia. Sin embargo, los coeficientes de determinación muestran una tendencia lineal con las muestras de predicción (ver Figura 16a, 16b, y 16c), y una tendencia no lineal para la propiedad de cenizas (ver Figura 16d).

Figura 16.

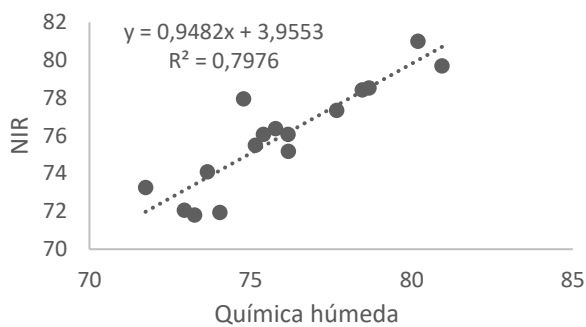
Datos predichos vs datos de referencia equipo ProxiMate®.



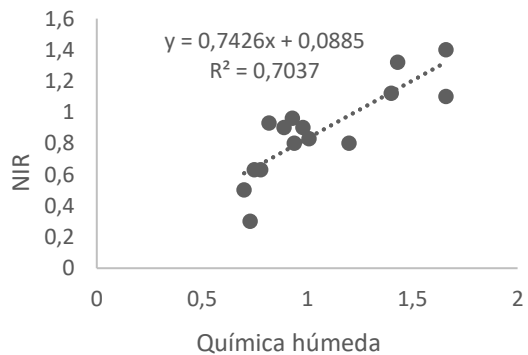
a) Proteína



b) Grasa



c) Humedad



d) Cenizas

En la Tabla 10 se presenta la interpretación de los rangos de valor para la métrica *RPD* en lectura de composición para granos, harinas, y comida en general.

Tabla 10.*Estadísticas de RPD.*

Valor RPD	Clasificación	Aplicación
0,0 – 1,4	Poco confiable	No recomendado
1,4 – 2,0	Justo	Proyección
>2,0	Modelos excelentes	Cualquier aplicación

Nota. Adaptado de (Shen et al., 2023)

Según los valores de *RPD* obtenidos en la Tabla 9, nos encontramos en una proyección óptima para cualquier aplicación en las propiedades de proteína, grasa, y humedad; para la propiedad de ceniza una predicción justa.

Sin embargo, Hong-Ju He en su estudio titulado *Rapid determination of chemical compositions in chicken flesh by mining hyperspectral data* utilizando 203 muestras en la fase de calibración y 67 en la fase de predicción obtuvo valores de *RPD* mayores a 2,0; *RMSEP* 0,588; 0,376 Y 0,120 y R^2 0,92; 0,93 y 0,3 para las propiedades de proteína, humedad y ceniza respectivamente (He et al., 2023). Para la propiedad de grasa Paulo Henrique Dias Diniz reportó un *RPD* de 3,02 *RMSEP* de 1,59 y R^2 de 0,94 utilizando 70 muestras en la fase de calibración (Diniz et al., 2018).

6. Conclusiones

El uso del software *The Unscrambler X* dio a conocer la correlación existente entre la información espectral obtenida por la técnica NIR y los modelos de calibración de regresión multivariantes PLS. Esto concluye en una matriz de regresión completa a nuevas muestras fuera de la calibración.

Con un *RPD* de 2,150 para la propiedad de humedad, 2,306 para proteína y 2,144 para grasa, indica que el equipo ProxiMate® tiene una predicción confiable dentro del rango de un modelo funcional, sin embargo, la propiedad de ceniza al presentar un *RPD* de 1,469 se considera de predicción justa, poco confiable. Asimismo, el R^2 para la propiedad de ceniza vista en la figura 15d con un 18% de relación lineal entre los valores predichos por el software *The Unscrambler X* y los valores estándar del laboratorio, indican que el modelo desarrollado hasta este punto del estudio no tiene una aplicabilidad confiable, esto se debe a la limitada cantidad de muestras que se usaron en la fase de calibración y validación. Sin embargo, las predicciones obtenidas por el modelo del software, demuestra que ante un pretratamiento espectral y un uso óptimo de factores PLS, la técnica NIR tiene potencial como apoyo de laboratorio para el control de calidad bromatológica de la carne de pollo. La integración futura de nuevas muestras al modelo de calibración del equipo fortalecerá su robustez, mejorando la precisión de las predicciones, y obteniendo así mejores resultados ante las métricas *RPD* que es la que indica la confiabilidad de la predicción para ser usada en el control de calidad.

7. Recomendaciones

Dado a que los espectros no son tan distintos entre el pernil-mixto y la pechuga de pollo, se recomienda construir una única matriz de calibración para ambas secciones de pollo. De esta forma se tendrá más información espectral, e incluso será beneficioso ante la variación existente entre los rangos de las diferentes propiedades bromatológicas.

Las lecturas espectrales son más precisas cuando se realizan en muestras frescas puesto que la amplia demora entre las pruebas bromatológicas tradicionales y las mediciones con la técnica NIR puede variar la composición de sus propiedades.

Referencias bibliográficas

- Baeten, V., & Dardenne, P. (2002). *Spectroscopy: Developments in Instrumentation and Analysis*.
- Blanco, M., Coello, J., Iturriaga, H., Maspocho, S., & Pages, J. P. (2000). NIR calibration in non-linear systems: different PLS approaches and artificial neural networks. In *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* (Vol. 50). Retrieved from www.elsevier.com/locate/chemometrics
- Bouhzam, I. (2020). *Aplicaciones de la Espectroscopia de Infrarrojo Cercano (NIR) para predecir el contenido y la actividad de agua del embutido tipo "Fuet."*
- Diniz, P. H. G. D., Krepper, G., Romeo, F., Fernandes, D. D. de S., de Araújo, M. C. U., Di Nezio, M. S., Pistonesi, M. F., & Centurión, M. E. (2018). Determination of fat content in chicken hamburgers using NIR spectroscopy and the Successive Projections Algorithm for interval selection in PLS regression (iSPA-PLS). *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 189, 300–306. doi: 10.1016/j.saa.2017.08.046
- Folli, G. S., Santos, L. P., Santos, F. D., Cunha, P. H. P., Schaffel, I. F., Borghi, F. T., Barros, I. H. A. S., Pires, A. A., Ribeiro, A. V. F. N., Romão, W., & Filgueiras, P. R. (2022). Food analysis by portable NIR spectrometer. *Food Chemistry Advances*, 1, 100074. doi: 10.1016/j.focha.2022.100074
- Gaitán, A. (2009). *APORTACIONES DE LA TECNOLOGÍA NIRS A LA CALIDAD DE PRODUCTOS AGROALIMENTARIOS*. Retrieved from www.uco.es/publicaciones
- García Uceda, L. (2020). *Utilización de la espectroscopia NIR en el análisis de identificación y control de calidad de productos farmacéuticos liofilizados*.
- Harris, P. J., & Altaner, C. M. (2013). *WORKSHOP ON COMMERCIAL APPLICATION OF IR SPECTROSCOPES TO SOLID WOOD*.
- He, H. J., Wang, Y., Ou, X., Ma, H., Liu, H., & Yan, J. (2023). Rapid determination of chemical compositions in chicken flesh by mining hyperspectral data. *Journal of Food Composition and Analysis*, 116. doi: 10.1016/j.jfca.2022.105069
- Javier, F. (2016). *UTILIZACIÓN DE LA TÉCNICA NIRS PARA EVALUAR LA COMPOSICIÓN QUÍMICA DE SUBPRODUCTOS VEGETALES DESTINADOS EN ALIMENTACIÓN ANIMAL*.
- Lamprey, F. P., Teye, E., Abano, E. E., & Amuah, C. L. Y. (2023). Application of handheld NIR spectrometer for simultaneous identification and quantification of quality parameters in intact mango fruits. *Smart Agricultural Technology*, 6. doi: 10.1016/j.atech.2023.100357

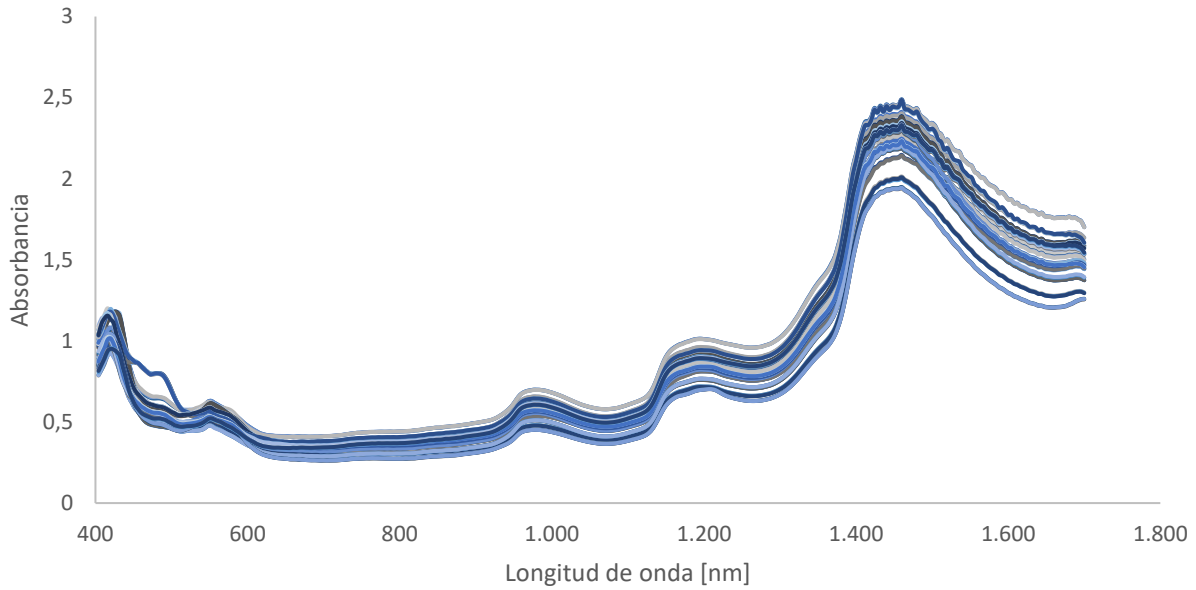
- Liao, Y. T., Fan, Y. X., & Cheng, F. (2010). On-line prediction of fresh pork quality using visible/near-infrared reflectance spectroscopy. *Meat Science*, 86(4), 901–907. doi: 10.1016/j.meatsci.2010.07.011
- Miguel, J., Martínez, R., Directora, Q., Sandra, M., & Castro Narváez, P. (2024). *Aplicación de la espectroscopia de infrarrojo cercano (NIRS) en productos cárnicos*.
- Mondragón Cortez, P. (2017). *ESPECTROSCOPIA DE INFRARROJO PARA TODOS ...y 51 espectros de alimentos consumidos en México*.
- Morcillo Rubio, J. (1981). *Espectroscopia infrarroja* (D. C. Sria. Gral. de la O. Washington, Ed.; 2nd ed.).
- Ortiz, A., Fallola, C., Labrador, J., Martín-Gallardo, J., Rodríguez, P., Trenzado, C., Pérez-Jiménez, A., García-Torres, S., & Tejerina, D. (2024). Espectroscopia en el infrarrojo cercano (NIRS) como herramienta para el control de calidad y trazabilidad de la carne de tenca (Tinca tinca). *Tec. Econ. Agrar*, 120(1), 13–29. doi: 10.12706/itea.2023.014
- Pasquini, C. (2003). Near infrared spectroscopy: Fundamentals, practical aspects and analytical applications. In *Journal of the Brazilian Chemical Society* (Vol. 14, Issue 2, pp. 198–219). Sociedade Brasileira de Quimica. doi: 10.1590/S0103-50532003000200006
- Peguero Gutiérrez, A. (2010). *La espectroscopia NIR en la determinación de propiedades físicas y composición química de intermedios de producción y productos acabados*.
- Porep, J. U., Kammerer, D. R., & Carle, R. (2015). On-line application of near infrared (NIR) spectroscopy in food production. In *Trends in Food Science and Technology* (Vol. 46, Issue 2, pp. 211–230). Elsevier Ltd. doi: 10.1016/j.tifs.2015.10.002
- Prado Marrón, N., Corujo Fernandez, A., González González, P., Sierra, V., & García, J. D. (n.d.). *Evaluación del uso de la tecnología VIS-NIR para el control in situ de la calidad microbiológica de la carne fresca de pollo*.
- Prieto, N., Andrés, S., Giráldez, F. J., Mantecón, A. R., & Lavín, P. (n.d.). *APLICACIÓN DE LA TECNOLOGÍA NIRS PARA ESTIMAR PARÁMETROS FÍSICOS INDICATIVOS DE LA CALIDAD DE LA CARNE DE VACUNO*.
- Priyashantha, H., Höjer, A., Saedén, K. H., Lundh, Å., Johansson, M., Bernes, G., Geladi, P., & Hetta, M. (2021). Determining the end-date of long-ripening cheese maturation using NIR hyperspectral image modelling: A feasibility study. *Food Control*, 130. doi: 10.1016/j.foodcont.2021.108316
- Reyes, S. (2024). *APLICACIÓN DE LA ESPECTROSCOPIA NIR Y HERRAMIENTAS QUIMIOMÉTRICAS PARA LA DETERMINACIÓN DE COMPONENTES*

QUÍMICOS DEL CAFÉ VERDE ESPECIAL PRODUCIDO EN LA PROVINCIA DE CHIRIQUÍ, PANAMÁ.

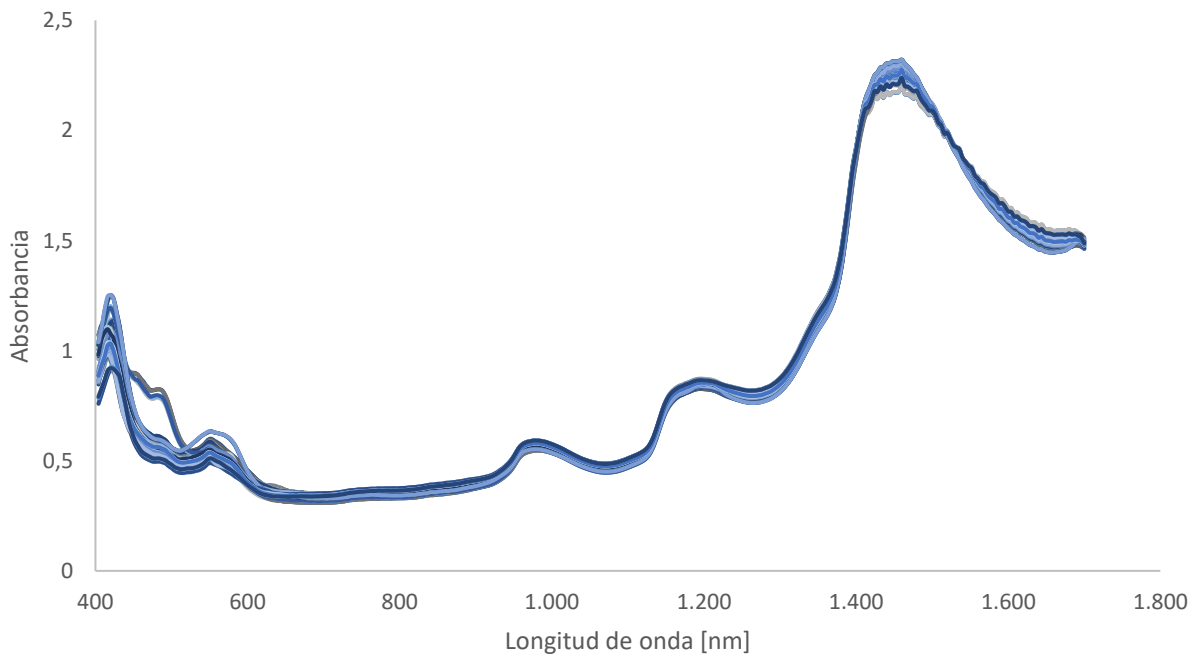
- Shen, X., Wang, T., Wei, J., Li, X., Deng, F., Niu, X., Wang, Y., Kan, J., Zhang, W., Yun, Y. H., & Chen, F. (2023). Potential of Near-Infrared Spectroscopy (NIRS) for Efficient Classification Based on Postharvest Storage Time, Cultivar and Maturity in Coconut Water. *Foods*, 12(12). doi: 10.3390/foods12122415
- Teixeira Badaró, A. (2021). *NIR spectral techniques and chemometrics applied to food processing*.
- Tejerina, D., Contador, R., & Ortiz, A. (2021). Near infrared spectroscopy (NIRS) as tool for classification into official commercial categories and shelf-life storage times of pre-sliced modified atmosphere packaged Iberian dry-cured loin. *Food Chemistry*, 356. doi: 10.1016/j.foodchem.2021.129733
- Trygg, J., & Wold, S. (1998). PLS regression on wavelet compressed NIR spectra. In *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* (Vol. 42).

Apéndices

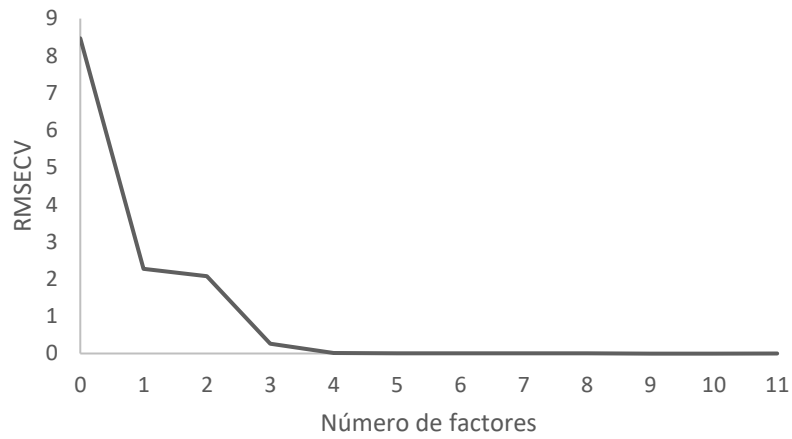
Apéndice A. Espectros sin tratamiento MSC para las muestras de calibración de pechuga de pollo



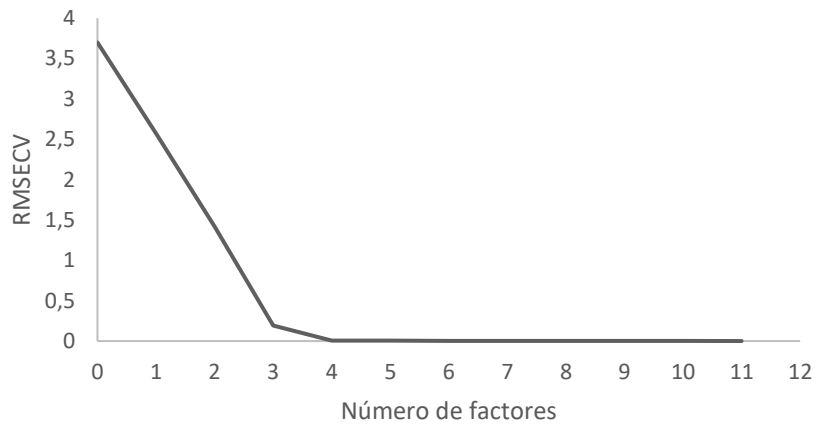
Apéndice B. Espectros con tratamiento MSC para las muestras de calibración de pechuga de pollo



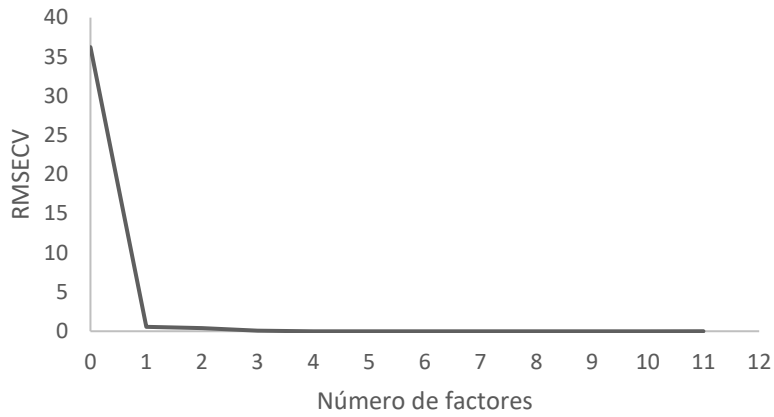
Apéndice C. Comportamiento RMSECV respecto al número de factores PLS para la propiedad de proteína de pechuga de pollo.



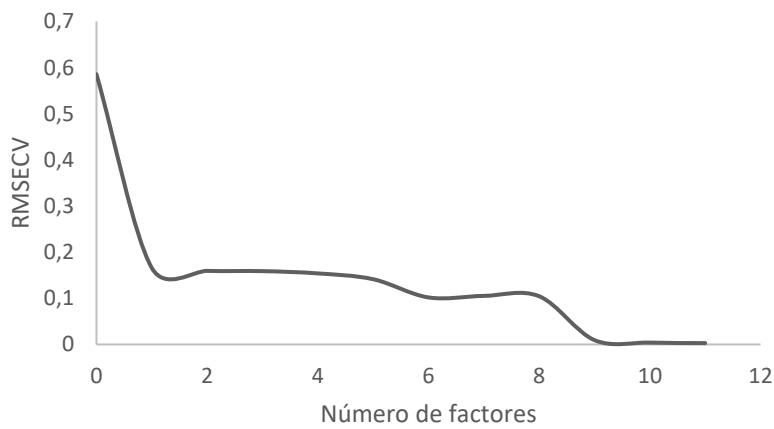
Apéndice D. Comportamiento RMSECV respecto al número de factores PLS para la propiedad de grasa de pechuga de pollo.



Apéndice E. Comportamiento RMSECV respecto al número de factores PLS para la propiedad de humedad de pechuga de pollo.



Apéndice F. Comportamiento del RMSECV respecto al número de factores para cenizas de las muestras de pechuga de pollo



Apéndice G. Resultados de calibración de las muestras de pechuga de pollo

Factor	Tratamiento	Proteína		Grasa		Humedad		Cenizas	
		R^2	$RMSEC$	R^2	$RMSEC$	R^2	$RMSEC$	R^2	$RMSEC$
-	-								
3	Ninguno	0,99	0,22	0,99	0,17	0,99	0,06	0,93	0,15
	MSC	0,99	0,013	0,99	0,0062	1	0,0037	0,932	0,149
4	Ninguno	0,99	0,01	0,99	0,0046	1	0,01	0,93	0,14
	MSC	0,99	0,004	0,99	0,0041	1	0,0023	0,948	0,1307

Apéndice H. Resultados de validación cruzada de las muestras de pechuga de pollo

Factor	Tratamiento	Proteína		Grasa		Humedad		Cenizas	
		R^2	$RMSECV$	R^2	$RMSECV$	R^2	$RMSECV$	R^2	$RMSECV$
-	-								
3	Ninguno	0,95	0,25	0,85	1,41	0,99	0,39	0,92	0,15
	MSC	0,99	0,01	0,99	0,009	0,99	0,01	0,929	0,15
4	Ninguno	0,99	0,001	0,99	0,005	1	0,035	0,92	0,155
	MSC	0,99	0,004	0,99	0,0046	1	0,003	0,94	0,14