

Determination of semolina adulteration by NIR spectroscopy

Determinación de la adulteración de sémola mediante espectroscopia NIR

Jimmy Oblitas-Cruz, M.Sc.¹, Yuleyci Cieza-Rimarachin², and Wilson Castro-Silupu, Dr.³

¹ Universidad Privada del Norte., Perú, jimy.oblitas@upn.edu.pe

² Universidad Nacional de Cajamarca, Perú, yciezar16_1@unc.edu.pe

³ Universidad Nacional de la Frontera, Perú, wcastro@unf.edu.pe

Abstract– The objective was to implement a semolina percentage recognition system using near-infrared spectroscopy (NIR) and multivariate data analysis. For this purpose, 6 samples were analyzed with different percentages of semolina (20, 40, 60, 80 and 100 %). Samples were repeated 20 times. The observed NIR spectrum was absorbance in the range of 1100 and 2500 nm. In order to reduce the data, the analysis of main components was used by testing 24 classification models, from which the one that reached the highest level of precision was the Linear Support Vector Machine (SVM) algorithm, reaching 98.8%, achieving fairly satisfactory discrimination with values of PC1 (99.7%), PC2 (0.3%) and PC3 (0.1%), reaching a total cumulative variation of the contribution of the first 3 PCs of 99.9%. Partial Least Regression (PLS) models applied to NIR- spectra showed R² between 0.9388. These values demonstrated that NIR spectroscopy can be used for the identification and quantification of fiber added to semolina.

Keywords-- Fiber, Near infrared spectroscopy, Semolina.

Resumen– El objetivo fue implementar un sistema de reconocimiento del porcentaje de sémola haciendo uso de la espectroscopia de infrarrojo cercano (NIR) y el análisis de datos multivariados. Para ello se analizó 6 muestras con diferentes porcentajes de sémola (20, 40, 60, 80 y 100 %). Las muestras fueron repetidas 20 veces. El espectro NIR observado fue la absorbancia en el rango de 1100 y 2500 nm. Para poder reducir los datos se usó el análisis de componentes principales probando 24 modelos de clasificación, del cual el que alcanzó el mayor nivel de precisión fue el algoritmo tipo Support vector machine (SVM) del tipo lineal, alcanzado un 98.8%, logrando una discriminación bastante satisfactoria con valores de PC1 (99.7%), PC2 (0.3%) y PC3 (0.1%), alcanzando una variación total acumulada de la contribución de los primeros 3 PC del 99,9%. Los modelos de regresión de mínimos cuadrados (PLS) aplicados a los espectros NIR mostraron R² de 0.9388. Estos resultados muestran que la técnica NIR se puede utilizar para la identificación y cuantificación de la fibra agregada a la sémola.

Palabras clave-- Fibra, Espectroscopia de infrarrojo cercano, Sémola.

I. INTRODUCCIÓN

La autenticidad de los alimentos es de interés primordial tanto para los consumidores como para los fabricantes, ya que las cadenas de suministro de alimentos se han vuelto cada vez

más complejas, es necesario garantizar la calidad de los alimentos y velar por el cumplimiento de la legislación nacional e internacional.[1]

En Perú se produce anualmente alrededor de 193.000 toneladas métricas (TM), pero la industria molinera demanda poco más de 2 millones de TM de trigo, siendo abastecido mayormente por importaciones [2].

El trigo es uno de los alimentos básicos más comunes y es popular en todo el mundo debido a su valor sensorial y nutricional, conveniencia y versatilidad, por lo que lo hace sujeto a posibles adulteraciones [3] por ejemplo el trigo duro es aproximadamente un 20-25% más caro que el trigo blando (*Triticum aestivum*)[4]

La sémola, un producto de endospermo granular producido por la molienda de trigo duro, se utiliza para hacer pasta, cereales calientes para el desayuno y comida para bebés [5], por lo que este producto de amplio consumo se convierte en un vehículo alimenticio apropiado para poder mejorar los nutrientes como vitaminas, proteínas y fibra a través de proceso de fortificación o mejoras de sus propiedades nutraceuticas. [6]

Se ha demostrado que la fortificación de alimentos es una estrategia eficaz para superar la deficiencia de micronutrientes, se han reportado investigaciones en harina de trigo y sémola con hierro para prevenir anemia [7], con ácido fólico [8], entre otros.

Otro de los insumos agregados es la fibra la cual ha reportados muchos beneficios a la salud, incluido la prevención de enfermedades relacionados al cáncer y enfermedades cardiovasculares [9], aunque según Badaro [10] la adición de ingredientes alternativos en la formulación de algunos productos puede afectar sus propiedades tecnológicas y sensoriales. Por lo tanto, es necesario determinar exactamente la cantidad del insumo agregado en el producto principal para poder tenerlo en cuenta para su posterior uso.

Los sistemas que funcionan en el rango visible del espectro electromagnético no suelen ser suficientes para detectar parámetros químicos y biológicos por lo que las herramientas espectroscópicas usadas y aplicadas en productos agrarios es diversa como las imágenes hiperespectrales [11], espectroscopia del Dominio del tiempo [12], espectroscopia dieléctricas [13], en particular, la espectroscopia del Infrarrojo cercano a sido utilizada para discriminar trigo [14].

Digital Object Identifier (DOI):

<http://dx.doi.org/10.18687/LACCEI2022.1.1.69>

ISBN: 978-628-95207-0-5 **ISSN:** 2414-6390

La espectroscopia de infrarrojo cercano (NIR) es una técnica de análisis rápida y no destructiva con buena reproducibilidad, ha sido ampliamente aplicada para la detección rápida de composiciones de alimentos y evaluación de calidad en productos alimenticios [15]. La espectroscopia de infrarrojo cercano (NIR) y las imágenes NIR se utilizaron para estudiar el trigo duro; de hecho, esta técnica presenta muchas ventajas (es decir, puede ser no destructiva y puede que no requiera pretratamiento de la muestra, es relativamente barata y automatizable para fines industriales) que la convierten en una tecnología adecuada ante un problema de autenticación/caracterización[16].

Pero las solas técnicas de espectroscopia NIR no son suficientes sin un adecuado tratamiento de los datos con técnicas multivariadas que optimicen la capacidad predictiva de los modelos mismos, lo cual puede conducir a modelos más robustos, una de las técnicas multivariadas más potentes que se utilizan en la calibración NIRS son los mínimos cuadrados parciales (PLS), ya que suele dar modelos de regresión muy estables [17].

El objetivo buscado en la investigación es evaluar el potencial de la espectroscopia del infrarrojo cercano (NIR) y proponer una metodología para la clasificación de diferentes tipos de fibra agregada a la sémola usando un enfoque de análisis multivariado.

II. MATERIALES Y MÉTODOS

A. Muestras de sémola

En el presente estudio se utilizaron 6 muestras en las cuales se prepararon colocando en la sémola diversos porcentajes de fibra al 100%, 80%, 60%, 40%, 20% y 0%, de acuerdo a la Tabla 1. Las muestras se mezclaron vigorosamente para obtener un peso total de muestra de 100 g en cada tipo de mezcla de sémola y fibra, preparando 20 muestras de cada tipo, haciendo un total de 120 muestras analizadas.

TABLA I
CLASIFICACION DE MUESTRAS

% Semola	% Fibra	Número de muestras
100	0	20
80	20	20
60	40	20
40	60	20
20	80	20
0	100	20

B. Toma de datos NIR

Cada muestra de 100g se mezcló siempre cuidadosamente para cada una de las 20 repeticiones, de las cuales se adquirió un espectro y una imagen de cada muestra. En la investigación se utilizó un espectrómetro infrarrojo cercano Unity Scientific NIRS (SpectraStar 2500XL, EE.UU.) equipada con lámpara halógena de tungsteno como fuente de luz y detector InGaAs

(Indio – Galio – Arsénico) en el rango de 1100 y 2500 nm, con una resolución de de 3 nm y 467 longitudes de onda.

C. Pretratamiento de perfiles espectrales

Se aplicó mejoras espectrales como filtrado espectral, suavizado, normalización, centrado medio y auto escalado, esto de acuerdo a ElMasry [18] es necesario para mejorar los perfiles espectrales extraídos ya que contienen ruido y variabilidad. El procedimiento se repitió para todas las imágenes adquiridas. La segmentación de imágenes y la extracción del espectro se realizaron utilizando el software Matlab R2019b.

D. Analisis multivariante

Se usará el método de Análisis de Componentes Principales (PCA) como un método de reconocimiento común sin supervisión, se aplicó en primer lugar para la exploración inicial para visualizar el marco de datos e identificar observaciones confusas o valores atípicos. El PCA es un método no supervisado que combina linealmente las variables en componentes principales (PC), que explican la mayor variación en el conjunto de datos y mantienen solo la información relevante de los espectros [19].

PCA se ha convertido en una de las herramientas más amplias para explorar similitudes y patrones ocultos entre muestras donde la relación en los datos y la agrupación son hasta poco claras [20]. En la presente investigación se usó para reducir las dimensiones de la matriz de datos de las muestras y se extrajo la información principal registrados para obtener una visión general utilizando PCA.

Uno de los objetivos del presente trabajo es desarrollar una metodología analítica, basada en el análisis NIR, que permita discriminar la sémola mezclada con fibra, para ello se generó una regresión tipo PLS. El algoritmo de regresión PLS (Partial Least Squares), desarrollado con un método de clasificación lineal que se utiliza bien como análisis discriminante que podría cubrir las variables correlacionadas o multicolineales en los datos.

El análisis de datos multivariados se realizó utilizando el software Matlab R2019b.

III. RESULTADOS

A. Determinación de características espectrales

los espectros NIR se muestran en la figura 1, donde se graficó con valores de la Reflectancia, se observa claramente la diferenciación de los espectros en cada nivel de Fibra que se usó, sobre todo en las regiones de 1400 nm a 1800 nm y de 2000 nm a 2200 nm, rangos parecidos han sido encontrados en investigaciones similares en trigo-fibra[10] y de trigo-maní [21], las ligeras diferencias en las longitudes puede deberse a la composición de la fibra y el tamaño de partícula de las mezclas observadas.

El gráfico ha sido pretratado ya que debido a que la longitud de onda en la radiación electromagnética NIR es

comparable al tamaño de partícula en muestras biológicas, el espectro NIR registrado puede verse afectado por efectos de dispersión no deseados[22], eso paso es necesario para el modelado posterior.

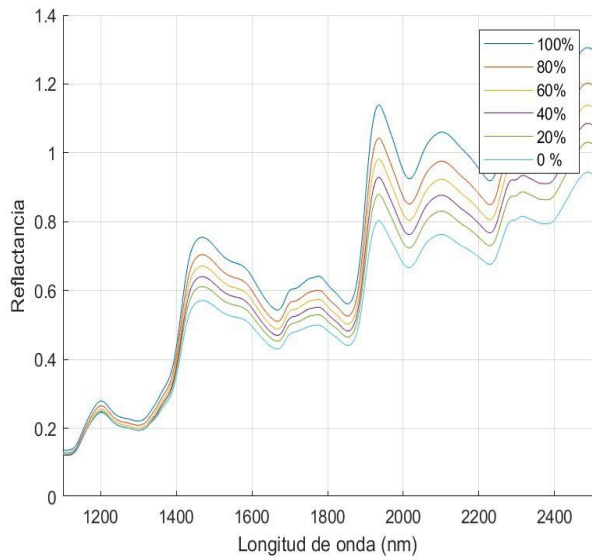


Fig. 1 Espectro NIR promedio de muestras de semola

B. Análisis exploratorio de datos

El análisis de componentes principales solo se puede utilizar como un método de reconocimiento de patrones no supervisado, este procedimiento puede indicar la tendencia de los datos de forma gráfica, por ello se aplicó a todo el conjunto de datos NIR para evaluar si se podía clasificar adecuadamente a las muestras de sémola/fibra. Para visualizar la tendencia de agrupamiento de estas muestras, se trazó un gráfico de dispersión con los primeros 3 componentes principales (PC) emitidos desde PCA (es decir, PC1, PC2, PC3), que se muestran en la figura 2

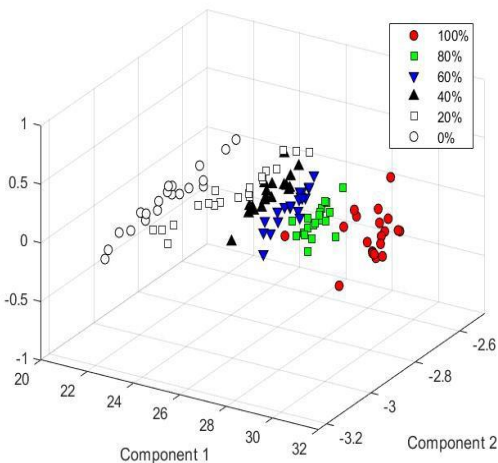


Fig. 2. Resultados de PCA

El modelo de PCA se presentan como modelos de múltiples clases, es decir, cada muestra de las mezclas sémola/fibra se presenta por separado como una clase. Como PCA es un algoritmo no supervisado, la información de la clase no afectará al modelo, ya que crea una separación de las muestras basada solo en los datos espectrales[23]. Como era de esperarse los seis grupos parecen estar bien divididos, excepto por una ligera superposición entre las muestras de 80% y 100% de fibra que caen en valores similares para las dos primeras variantes canónicas, pero son distinguibles todas las muestras.

El modelo de PCA aplicado llegó a una discriminación bastante satisfactoria, PC1 dio una explicación del 99,7% de la varianza, PC2 dio una explicación del 0,2% de la varianza y PC3 dio una explicación del 0,1% de la varianza, los dos primeros componentes principales de ambas técnicas explicaron más del 90% de la varianza total de las muestras. De acuerdo a Manley [24] esta variabilidad observada podría deberse al mayor tamaño de partícula de las muestras, lo que podría afectar la señal espectral.

Modelo de clasificación

Debido a que la variabilidad siguió un perfil no lineal, se probó el modelo de clasificación denominado Support Vector Machines (SVM), la literatura muestra que este modelo de regresión obtenidos con espectros NIR dan mejores resultados[25]. SVM tiene un rendimiento relativamente bueno y fácil accesibilidad, siendo su mayor ventaja la capacidad para modelar relaciones no lineales [26]

TABLA II
MODELOS CON MEJOR PRECISIÓN

Modelo	Precisión
Linear SVM	93.3
Quadratic SVM	93.3
Medium Gaussian SVM	92.5

Support Vector Machines dio un nivel de precisión de 93.88% para la de las mezclas sémola/fibra. Para ello se calculó la matriz de confusión para cada clase, como se muestra en la Figura 3.

Si bien los modelos tienen una alta precisión para la discriminación de las muestras Semola/fibra es necesario comentar que las muestras fueron homogenizadas adecuadamente, siendo este un paso esencial para la toma de datos NIR en la investigación realizada. Este aspecto podría ser particularmente útil para futuras investigaciones en aplicaciones de espectroscopia y captura de imágenes; o en aplicaciones industriales del almacenamiento y envasado de sémola ya que la clasificación a parte de posibles adulteraciones con fibras también está en relación con su funcionalidad y calidad de uso final, este concepto involucra que se debe tomar en cuenta las muestras homogenizadas tomadas de silos industriales esto para poder garantizar la homogeneidad necesaria antes de generar el análisis NIR.

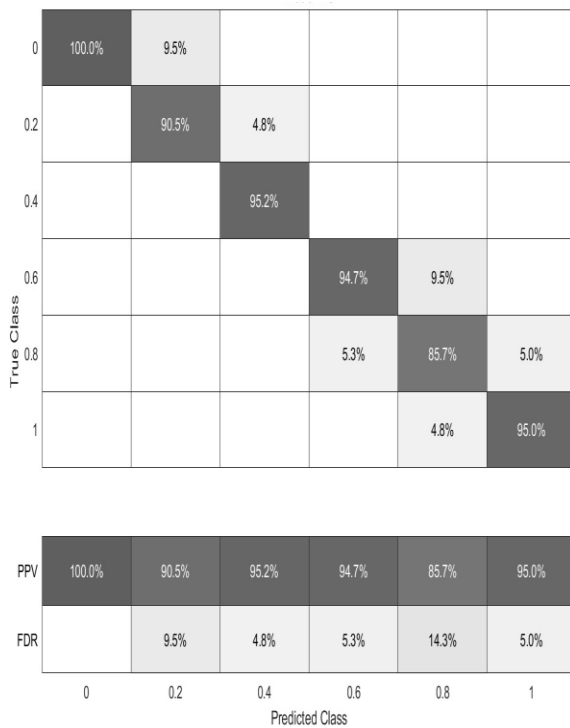


Fig. 3. Matriz de Confusión para modelo SVM

Luego de evaluar la capacidad de clasificación se evaluó un modelo de predicción de las características de mezcla de la sémola usando PLS con una validación cruzada. Para ello se buscó optimizar el mejor modelo obtenido en la fase de clasificación, esto con el objetivo de trasladar los parámetros iniciales a la regresión a través del modelo optimizado de Support Vector Machines, el cual se logró usando 30 interacciones con una función de optimización del tipo bayesiano, la figura 4 muestra esta obtención de datos donde se observa que se optimiza antes de la décima interacción.

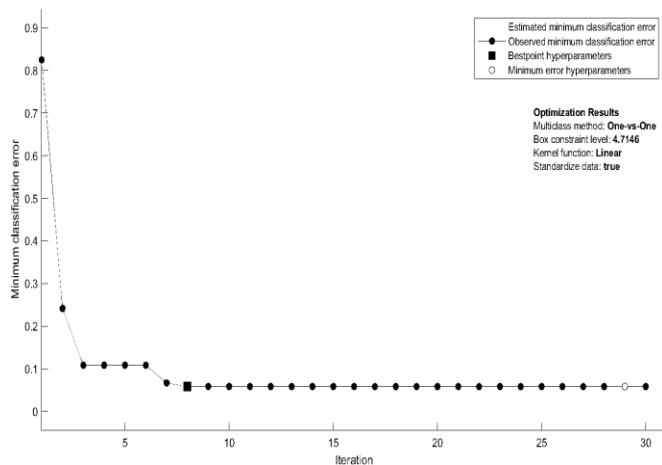


Fig. 4. Optimización de parámetros

Los espectros NIR se utilizaron como primer bloque de entrada y los porcentajes de mezcla como el segundo. Al igual que en el análisis discriminante, el espectro promedio de cada muestra arrojó resultados prometedores para cuantificar la cantidad de fibra agregada en la sémola, pudiendo predecir la cantidad de fibra añadida a la sémola con R^2 de 0.9388, tal como se observa en la figura 5. Estos resultados concuerdan con los encontrados en sémola superiores a 0.85 [10]

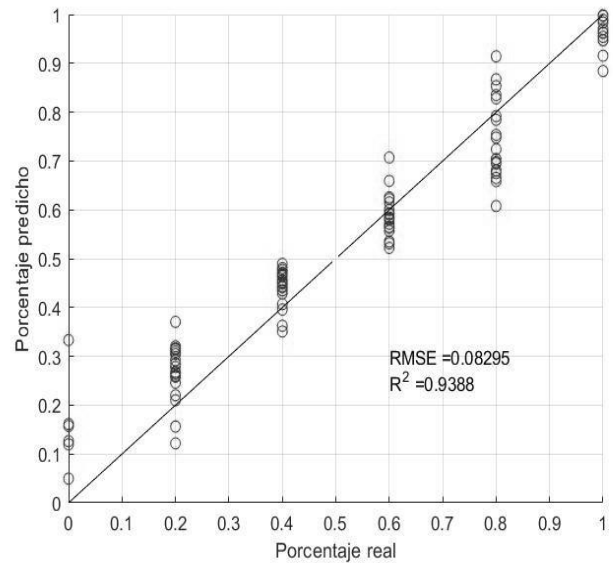


Fig. 5. Modelo de regresión PLS

De acuerdo con estos resultados, los modelos de calibración desarrollados son representativos y pueden ser utilizados en la determinación del contenido de fibra. A pesar de que NIRS se ha utilizado ampliamente para analizar diferentes matrices, sigue siendo un desafío cuando se utiliza en productos alimenticios, ya que son matrices muy heterogéneas [27], y mucho más en materiales del tipo harinas o muestras secas y molidas, tal como investigaciones han demostrado en la evaluación del origen geográfico de la sémola italiana de *Triticum durum* [16]

IV. CONCLUSIONES

Se ha demostrado la viabilidad de diferenciación y predicción de la sémola mezclada con fibra usando espectros del Infrarrojo cercano (NIR), sumado a métodos de análisis multivariado como PCA y PLS donde se analizó los diversos algoritmos para el mejor reconocimiento de los patrones a identificar. De acuerdo al estudio se llegó a la conclusión que los métodos usados en el análisis de los datos son factibles de ser automatizados, con lo cual los resultados pasan a ser un punto inicial para poder ayudar a la determinación de posibles adulteraciones de la sémola de una manera no destructiva y fiable en los centros de acopio y exportación de este tipo de

producto, convirtiéndose en una herramienta poderosa para detectar posibles adulteraciones.

Dado que el método desarrollado tiene una buena capacidad para identificar la fibra añadida a muestras de sémola, podría incluirse también otros parámetros de calidad de este tipo de productos, generando análisis multiparametro a través del uso de la espectroscopia NIR la cual lograría abrir un campo de determinación rápida y múltiple en el uso industrial de este tipo de tecnología.

Por otro lado, en materiales pulverulentos como la sémola es necesario tener en cuenta sus parámetros iniciales de tamaño de partícula y nivel de homogenización de la muestra, mucho más si se sospecha que puede estar mezclado con otro producto como la fibra analizada en esta investigación, no tomar en cuenta estos parámetros puede llevar a que la discriminación entre muestras se vea afectado mucho más en técnicas donde se usa técnicas espectroscópicas como NIR.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo financiero del Proyecto Concytec - Banco Mundial “Desarrollo de Modelos Predictivos de Calidad de Alimentos Basados en Tecnología de Imágenes THz”, a través de su unidad ejecutora Fondecyt. [contrato número 006-2018-FONDECYT / BM-Mejoramiento de la infraestructura para la investigación (equipamiento)]

REFERENCES

[1] A. De Girolamo et al., «A simple design for the validation of a FT-NIR screening method: Application to the detection of durum wheat pasta adulteration», *Food Chemistry*, vol. 333, p. 127449, dic. 2020, doi: 10.1016/j.foodchem.2020.127449.

[2] N. E. C. PERÚ, «Producción de industria del trigo crecerá ligeramente este 2019, prevé Scotiabank | ECONOMIA», *El Comercio Perú*, may 07, 2019, <https://elcomercio.pe/economia/peru/produccion-industria-trigo-creceria-ligeramente-2019-preve-sciotiabank-noticia-nndc-632959-noticia/> (accedido ene. 16, 2021).

[3] S. R. Delwiche, «18 - Advances in the Identification of Adulterated Cereals and Cereal Products», en *Advances in Food Authenticity Testing*, G. Downey, Ed. Woodhead Publishing, 2016, pp. 491-518.

[4] E. Hong et al., «Modern analytical methods for the detection of food fraud and adulteration by food category», *Journal of the Science of Food and Agriculture*, vol. 97, n.º 12, pp. 3877-3896, 2017, doi: <https://doi.org/10.1002/jsfa.8364>.

[5] R. Hirawan y T. Beta, «Chapter 1 - Whole Wheat Pasta and Health», en *Wheat and Rice in Disease Prevention and Health*, R. R. Watson, V. R. Preedy, y S. Zibadi, Eds. San Diego: Academic Press, 2014, pp. 5-16.

[6] W. T. Lai et al., «A review: Modified agricultural by-products for the development and fortification of food products and nutraceuticals», *Trends in Food Science & Technology*, vol. 59, pp. 148-160, ene. 2017, doi: 10.1016/j.tifs.2016.11.014.

[7] G. O. Latunde-Dada, M. F. Aslam, P. R. Ellis, S. E. Berry, y P. A. Sharp, «Chapter 39 - Wheat Flour Fortification to Prevent Iron-Deficiency Anemia», en *Flour and Breads and their Fortification in Health and Disease Prevention (Second Edition)*, V. R. Preedy y R. R. Watson, Eds. Academic Press, 2019, pp. 485-491.

[8] S. Hirsch, M. P. de la Maza, G. Barrera, L. Leiva, y D. Bunout, «Chapter 32 - Folic Acid and Colon Cancer: Impact of Wheat Flour Fortification With Folic Acid», en *Flour and Breads and their Fortification in Health and Disease Prevention (Second Edition)*, V. R. Preedy y R. R. Watson, Eds. Academic Press, 2019, pp. 413-421.

[9] Y. O. Li y A. R. Komarek, «Dietary fibre basics: Health, nutrition, analysis, and applications», *Food Quality and Safety*, vol. 1, n.º 1, pp. 47-59, mar. 2017, doi: 10.1093/ijqsaf/lyx007.

[10] A. T. Badaró, F. L. Morimitsu, A. R. Ferreira, M. T. P. S. Clerici, y D. Fernandes Barbin, «Identification of fiber added to semolina by near infrared (NIR) spectral techniques», *Food Chemistry*, vol. 289, pp. 195-203, ago. 2019, doi: 10.1016/j.foodchem.2019.03.057.

[11] W. Castro, J. Oblitas, J. Maicelo, y H. Avila-George, «Evaluation of Expert Systems Techniques for Classifying Different Stages of Coffee Rust Infection in Hyperspectral Images», *International Journal of Computational Intelligence Systems*, vol. 11, n.º 1, pp. 86-100, ene. 2018, doi: 10.2991/ijcis.11.1.8.

[12] J. O. Cruz, «Terahertz Time-domain Spectroscopy (THz-TDS) for classification of blueberries according to their maturity», presentado en *Proceedings of the 2020 IEEE Engineering International Research Conference, EIRCON 2020*, 2020, doi: 10.1109/EIRCON51178.2020.9254046.

[13] T. C. Trigo, J. O. Cruz, H. A. Minano, y W. C. Silupu, «Application of Machine Learning in the Discrimination of Citrus Fruit Juices: Uses of Dielectric Spectroscopy», presentado en *Proceedings of the 2020 IEEE Engineering International Research Conference, EIRCON 2020*, 2020, doi: 10.1109/EIRCON51178.2020.9253756.

[14] M. Cocchi, C. Durante, G. Foca, A. Marchetti, L. Tassi, y A. Ulrici, «Durum wheat adulteration detection by NIR spectroscopy multivariate calibration», *Talanta*, vol. 68, n.º 5, pp. 1505-1511, feb. 2006, doi: 10.1016/j.talanta.2005.08.005.

[15] C. Pasquini, «Near infrared spectroscopy: A mature analytical technique with new perspectives – A review», *Analytica Chimica Acta*, vol. 1026, pp. 8-36, oct. 2018, doi: 10.1016/j.aca.2018.04.004.

[16] P. Firmani, A. Nardecchia, F. Nocente, L. Gazza, F. Marini, y A. Biancolillo, «Multi-block classification of Italian semolina based on Near Infrared Spectroscopy (NIR) analysis and alveographic indices», *Food Chemistry*, vol. 309, p. 125677, mar. 2020, doi: 10.1016/j.foodchem.2019.125677.

[17] M. N. Uddin, T. Ferdous, Z. Islam, M. S. Jahan, y M. A. Quaiyyum, «Development of chemometric model for characterization of non-wood by FT-NIR data», *Journal of Bioresources and Bioproducts*, vol. 5, n.º 3, pp. 196-203, ago. 2020, doi: 10.1016/j.jobab.2020.07.005.

[18] G. M. ElMasry y S. Nakauchi, «Image analysis operations applied to hyperspectral images for non-invasive sensing of food quality – A comprehensive review», *Biosystems Engineering*, vol. 142, pp. 53-82, feb. 2016, doi: 10.1016/j.biosystemseng.2015.11.009.

[19] Rachmawati, E. Rohaeti, y M. Rafi, «Combination of near infrared spectroscopy and chemometrics for authentication of taro flour from wheat and sago flour», *J. Phys.: Conf. Ser.*, vol. 835, p. 012011, may 2017, doi: 10.1088/1742-6596/835/1/012011.

[20] J. Oblitas et al., «The Use of Correlation, Association and Regression Techniques for Analyzing Processes and Food Products», *Mathematical and Statistical Applications in Food Engineering*, ene. 30, 2020. <https://www.taylorfrancis.com/> (accedido sep. 28, 2020).

[21] P. Mishra et al., «Detection and Quantification of Peanut Traces in Wheat Flour by near Infrared Hyperspectral Imaging Spectroscopy Using Principal-Component Analysis», *J. Near Infrared Spectrosc., JNIRS*, vol. 23, n.º 1, pp. 15-22, feb. 2015.

[22] Y. Sun et al., «Rapid identification of geographical origin of sea cucumbers *Apostichopus japonicus* using FT-NIR coupled with light gradient boosting machine», *Food Control*, p. 107883, ene. 2021, doi: 10.1016/j.foodcont.2021.107883.

[23] T. F. McGrath et al., «What are the scientific challenges in moving from targeted to non-targeted methods for food fraud testing and how can they be addressed? – Spectroscopy case study», *Trends in Food Science & Technology*, vol. 76, pp. 38-55, jun. 2018, doi: 10.1016/j.tifs.2018.04.001.

- [24] M. Manley, «Near-infrared spectroscopy and hyperspectral imaging: non-destructive analysis of biological materials», *Chemical Society Reviews*, vol. 43, n.º 24, pp. 8200-8214, 2014, doi: 10.1039/C4CS00062E.
- [25] C. Malegori, E. J. Nascimento Marques, S. T. de Freitas, M. F. Pimentel, C. Pasquini, y E. Casiraghi, «Comparing the analytical performances of Micro-NIR and FT-NIR spectrometers in the evaluation of acerola fruit quality, using PLS and SVM regression algorithms», *Talanta*, vol. 165, pp. 112-116, abr. 2017, doi: 10.1016/j.talanta.2016.12.035.
- [26] U. Thissen, M. Pepers, B. Üstün, W. J. Melssen, y L. M. C. Buydens, «Comparing support vector machines to PLS for spectral regression applications», *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, vol. 73, n.º 2, pp. 169-179, oct. 2004, doi: 10.1016/j.chemolab.2004.01.002.
- [27] J. U. Porep, D. R. Kammerer, y R. Carle, «On-line application of near infrared (NIR) spectroscopy in food production», *Trends in Food Science & Technology*, vol. 46, n.º 2, Part A, pp. 211-230, dic. 2015, doi: 10.1016/j.tifs.2015.10.002.