

**Universidad Central “Marta Abreu” de Las Villas
Facultad de Ciencias Agropecuarias
Departamento de Ingeniería Agrícola**



**Determinación de la concentración de minerales en
malanga morada (*Colocasia esculenta* (L.) Schott)
mediante espectroscopia vis-NIR**

**Tesis presentada en opción al título académico de Master en
Ingeniería Agrícola**

Autora: Ing. Sandra Adyenne Sánchez Valle

Tutor: Dr. C. Ahmed Chacón Iznaga

Consultante: Dra. C. Marilys Diley Milián Jiménez

Santa Clara

2019

Pensamiento



Pensamiento

“(...) en la agricultura está la base de nuestro desarrollo, y tenemos muy buenas condiciones para el desarrollo de esa agricultura (...)”

Fidel Castro



Dedicatoria



Dedicatoria

A mi hermano Edgar por haber estado siempre a mi lado con su amor y apoyo incondicional. Para ti mi hermano querido, te dedico otra meta alcanzada en mi vida profesional.

Agradecimientos



Agradecimientos

A mi abuela Eneida por haber estado presente en los momentos más difíciles de mi vida, siendo su compañía una fortaleza inmensa en mi superación,

A mi novio Ariel por haber estado a mi lado desde mis mediados años de estudios en esta carrera hasta que me gradué y que hoy en día, el sigue formando parte de otro logro profesional junto a mí,

A mis restantes familiares por su preocupación durante toda mi formación,

A mis amistades por la ayuda emocional, consejos y alegrías compartidas,

A todos mis compañeros del departamento de Ingeniería Agrícola por la solidaridad y disposición durante todo este tiempo de superación. Resaltando a nuestro Jefe Omar que más que ese cargo, es un amigo para todos nosotros, de personalidad muy agradable y me ha guiado con éxitos desde que entre a esta facultad como estudiante, Agradecer de forma muy especial, a mi tutor Ahmed por su dedicación, orientación y colaboración en la realización del trabajo, siendo su tutoría una gran satisfacción y ayuda durante mi formación.

A todos ustedes, Muchas Gracias.

Resumen



Resumen

En los últimos años se ha aumentado la diversificación agrícola hacia sectores como las raíces y tubérculos, así como las frutas y las hortalizas, debido a que constituyen una de las fuentes más importantes de vitaminas y minerales en la dieta humana. La determinación no destructiva de la calidad interna de estos productos agropecuarios es un objetivo prioritario en las investigaciones más recientes. La espectroscopia en el visible (vis) e Infrarrojo cercano (NIR) se ha convertido en una técnica analítica muy útil para la determinación no destructiva de parámetros de calidad en alimentos, adaptándose plenamente a estos cultivos en términos de control de calidad. El objetivo principal de esta investigación está encaminado a determinar la concentración de minerales en tres cultivares de malanga morada mediante el uso de la técnica de espectroscopia vis-NIR. Las metodologías utilizadas incluyen la metodología para la preparación de las muestras de malanga, para la realización de los análisis químicos, para la determinación de los espectros y para el procesamiento de los resultados. El principal resultado de esta investigación es proponer un método para la determinación no destructiva de la concentración de minerales en malanga mediante la técnica de espectroscopia vis-NIR.

Abstract



Abstract

Over the last few decades, the agricultural diversification has increased toward sectors like the roots and tubers production as well as the fruits and the vegetables production. These crops constitute one of the most important sources of vitamins and minerals in the human diet. The non-destructive determination of the internal quality of these agricultural products is a high-priority objective in the most recent investigations. Visible (vis) and near infrared (NIR) reflectance spectroscopy technique has become in a very useful analytic technique for the non-destructive determination of food quality parameters. This technique is completely adapted to these cultivations in terms of quality control. The main objective of this investigation aims to determine the concentration of minerals in three cultivars of purple taro by using the spectroscopy technique vis-NIR. The methodologies include the sample preparation of taro for chemical analysis, the spectral analysis of these samples and the use of multivariate data analysis techniques. The main result of this research was to propose a method for non-destructive determination of mineral concentration of Taro by using vis-NIR spectroscopy technique.

Índice



Índice

Introducción	1
Capítulo I. Revisión Bibliográfica.....	6
1.1 Características generales del cultivo de la malanga	6
1.1.2 Principales países productores a nivel mundial.....	7
1.1.3 Importancia de la malanga y principales usos.....	8
1.1.4 Composición química y nutricional.....	9
1.2 Técnicas y métodos para determinar la concentración de minerales de un cultivo.....	11
1.2.1 Técnicas destructivas.....	12
1.2.2 Técnicas no destructivas.....	13
1.3 Elementos de la espectroscopia vis-NIR	13
1.4 Análisis quimiométrico de datos espectroscópicos vis-NIR	18
1.5 Análisis de las investigaciones realizadas sobre el tema objeto de estudio.....	21
Capítulo II. Materiales y Métodos.....	23
2.1 Metodología para la selección de las muestras.....	23
2.2 Metodología para el cálculo de la muestra	23
2.3 Metodología para el análisis de minerales por la técnica de espectroscopia de absorción atómica	24
2.4 Metodología para la determinación de los espectros de reflectancia	25
2.5 Metodología para el procesamiento de los resultados	27
Capítulo III. Resultados y Discusión.....	30
3.1 Determinación de los minerales y su concentración en los tres cultivares de malanga en estudio	30
3.2 Variabilidad de los espectros de reflectancia vis-NIR en diferentes longitudes de onda.....	39
3.3 Correlación de la concentración de minerales de los cultivares de malanga en estudio, con las lecturas de reflectancia espectral vis-NIR en diferentes longitudes de onda.....	41
Conclusiones	48
Recomendaciones.....	49
Referencias Bibliográficas	50

Introducción



Introducción

El cultivo de raíces, rizomas y tubérculos es una de la principales y más importantes actividades para la subsistencia del ser humano, por lo cual, la producción de los mismos es siempre una parte relevante de las economías de la mayoría de las regiones del planeta, independientemente de cuan avanzada sea la tecnología y su rentabilidad (Zapata y Velásquez, 2013).

En las últimas décadas, el potencial productivo de la agricultura mundial ha superado el crecimiento demográfico. Esto ha llevado a un lento pero constante aumento en la disponibilidad media de alimentos por habitante. En América Latina y el Caribe, contribuye con el 8% de la producción mundial de raíces y tubérculos (FAO, 2014a). Entre 2000 y 2011, la superficie dedicada a estos cultivos se expandió un 0,6%, ligeramente por debajo de la tasa global.

Uno de los rizomas rico en nutrientes y valioso en los países de clima tropical y subtropical es la malanga, la cual se cultiva para la alimentación humana, animal y para diferentes usos industriales. Este cultivo forma parte de la dieta diaria de millones de personas alrededor del mundo, constituyendo un alimento esencialmente energético debido al contenido de almidón, fibra dietaria, vitaminas y minerales. Debido a sus valores nutricionales y sus cualidades digestivas es un cultivo a tomar en cuenta en la dieta de hospitales, hogares y círculos infantiles (Espinosa, 2003).

La producción mundial de este cultivo se encuentra concentrada en un alto porcentaje en el continente americano (Centro y Suramérica y el Caribe) destacándose como los principales productores: Cuba que ostenta el primer lugar, con una producción de 185,900 toneladas en el año 2013, seguido por Venezuela con una producción de 105,000 toneladas en ese mismo año. Es importante resaltar la posición que ocupa El Salvador el tercer puesto a

nivel mundial y la principal competencia de nuestro país en producción de Malanga, atrás de ellos se suman Perú y República Dominicana (Ganadería, 2014).

En Cuba, este cultivo data de la época precolombina, en la que nuestros aborígenes la consumían y se utiliza tradicionalmente en la dieta infantil y para alimentar a cualquier tipo de enfermo, especialmente a los que padecen de úlceras gástricas y a los convalecientes.

Es importante destacar que la concentración de los minerales en los productos agrícolas juega un papel fundamental en la etapa poscosecha, según Herrera *et al.* (2008) y González (2010), ya que a mayores concentraciones de hierro, calcio y sodio, la vida de almacenamiento se hace más larga.

La determinación de las propiedades químicas en raíces, rizomas y tubérculos ha ido evolucionando según las exigencias del mercado; las mediciones instrumentales se han preferido sobre las evaluaciones sensoriales tanto por los investigadores como por la propia industria, ya que dichas mediciones reducen la variabilidad entre los individuos, son más precisas y pueden proporcionar un lenguaje común entre los investigadores, la industria y los consumidores (Flores, 2009).

La malanga (*Colocasia esculenta* (L.) Schott) representan una importante fuente de carbohidratos cuando son consumidos con carne u otros vegetales, además empleada en la elaboración de frituras. Sin embargo, dichos productos carecen de estudios sensoriales que permitan determinar su calidad sensorial y asimismo la preferencia o rechazo por parte de los consumidores. En este sentido, los análisis descriptivos o perfiles sensoriales son utilizados en la industria alimentaria para el mejoramiento y desarrollo de nuevos, donde el Análisis Descriptivo Cuantitativo permite obtener una descripción completa de las propiedades sensoriales del producto en estudio (Ramírez *et al.*, 2011).

La experiencia adquirida en Cuba sobre el cultivo, la riqueza genética conservada en la Isla y la existencia de métodos investigativos como los moleculares, constituyen motivaciones importantes para científicos, mejoradores y productores de la malanga del género *Colocasia* (Milián, 2018). Con el objetivo de garantizar el manejo sostenible del patrimonio genético existente, incluye un mayor acercamiento a la adecuada ubicación taxonómica de todos los cultivares y a un mejor conocimiento de sus características y potencial genético, que permita lograr su empleo efectivo en los programas de mejoramiento; así como el perfeccionamiento de las estrategias de conservación de los recursos disponibles.

La medición de la concentración de minerales en la malanga se realiza habitualmente mediante métodos químicos, lo que conlleva una considerable cantidad de trabajo manual, tiempo, recursos y además se trata de métodos destructivos. Es por ello que se hace importante encontrar métodos más rápidos que los tradicionales para analizar estas propiedades químicas.

El estudio de métodos y técnicas para conocer las propiedades de los materiales y sustancias simples o complejas, que absorben y emiten radiación (la cual puede ser caracterizada a partir de sus espectros), está siendo utilizado en campos tan diversos como: la astronomía, las comunicaciones, la biología y la salud; por sólo mencionar algunos de los derroteros que ha seguido esta tecnología, a lo largo de su desarrollo (González y Montaña, 2015). El término espectroscopia hace referencia a la observación y al estudio del espectro, y se basa en la interacción de la energía radiante con la materia. Esta interacción es tan específica que nos permite identificar el tipo y la cantidad de materia que interactuó.

El análisis por espectroscopia vis-NIR tiene muchas características que lo hacen atractivo: es rápido, fácil de usar y de naturaleza no destructiva. Su característica fundamental es que es capaz de reflejar en el espectro las transiciones vibracionales de las moléculas de los constituyentes químicos presentes en la muestra a estudio, tales como O-H, N-H y C-H (Bonett, 2013). La radiación vis-NIR cubre el rango del espectro electromagnético con longitud de onda entre 400 y 2500 nm.

En la actualidad la espectroscopia de infrarrojo (IR) se puede resumir en un espectro (por ejemplo, el número de onda de absorbancia), que luego se relacionan por medio de modelos matemáticos, a partir del comportamiento de las propiedades de interés de las muestras analizadas, con los datos obtenidos, se establece un modelo matemático, el cual se utiliza para la predicción de las propiedades en muestras que no fueron utilizadas para la calibración del modelo (Cobo *et al.*, 2010).

La aplicación de la espectroscopia vis-NIR en la realización de medidas no destructivas se ha investigado en numerosos productos alimentarios. Sin embargo, la bibliografía disponible sobre su aplicación en Cuba es limitada y a saber, en los estudios de la malanga no existen experiencias anteriores.

Esta técnica, es hoy en día, una de las alternativas más adecuadas para hacer frente a las exigencias de calidad en productos agrícolas, ya que combina rapidez y precisión en la medida, con una gran versatilidad, sencillez de presentación de la muestra, velocidad de recogida de datos (espectros), y es una técnica limpia que contribuye a la conservación del medio ambiente. Además, el espectro recoge tanto la información química como la física lo que permite determinar ambos tipos de propiedades a partir de un único análisis por lo cual planteamos el siguiente problema científico.

Problema científico

¿Cómo correlacionar los métodos de laboratorio convencionales para la predicción de minerales en cultivares de malanga morada, con la técnica de espectroscopia de reflectancia vis-NIR?

Hipótesis

La combinación de métodos convencionales de análisis químicos y espectroscópicos vis-NIR, permitirá el desarrollo de modelos matemáticos que correlacionen la reflectancia espectral con las concentraciones de los minerales de tres cultivares de malanga morada.

Objeto de estudio

Malanga morada

Objetivo general

Determinar la concentración de minerales en tres cultivares de malanga morada mediante el uso de la técnica de espectroscopia de reflectancia vis-NIR.

Objetivos específicos

1. Determinar en condiciones de laboratorio la concentración de minerales en tres cultivares de malanga morada.
2. Obtener mediante la técnica de espectroscopia vis-NIR la variabilidad de los espectros de reflectancia en diferentes longitudes de onda.
3. Correlacionar las concentraciones de los minerales de los cultivares de malanga morada en estudio, con las lecturas de reflectancia espectral vis-NIR en diferentes longitudes de onda.

Capítulo I



Capítulo I. Revisión Bibliográfica

1.1 Características generales del cultivo de la malanga

La malanga es uno de los primeros cultivos utilizados por el hombre. Se conocen con este nombre las especies comestibles de la familia Aráceas pertenecientes a los géneros *Colocasia* y *Xanthosoma*, el primero, es un cultivo muy antiguo y expandido en el Viejo Mundo e introducido en América por los colonizadores europeos, y el segundo es de origen americano y fue cultivado por los indios de las Antillas y el resto del continente antes del descubrimiento (López, 1995). Es cultivada por sus rizomas que se utilizan en la alimentación humana, animal y para diferentes usos industriales. Es un rizoma rico en nutrientes y valioso en los países de clima tropical y subtropical. Forma parte de la dieta diaria de millones de personas alrededor del mundo, constituyendo un alimento esencialmente energético debido al contenido de almidón, fibra dietaria, vitaminas y minerales. Debido a sus valores nutricionales y sus cualidades digestivas es un cultivo a tomar en cuenta en la dieta de hospitales, hogares y círculos infantiles (Espinosa, 2003).

Es una planta herbácea que no tiene tallo aéreo sino un rizoma o tallo principal subterráneo corto, del que brotan ramificaciones secundarias, laterales, horizontales, engrosadas, comestibles y que se les conoce como cormelos. Los cormelos tienen una corteza de color marrón oscuro y la pulpa es blanca o amarilla según la variedad y tienen nudos de donde nacen las yemas. En su base, las hojas forman un pseudo tallo cilíndrico corto; los pecíolos son largos y acanalados; la lámina es grande y sagitada; las hojas salen con inflorescencias, que tienen forma de espádice, la duración del ciclo de crecimiento es de 8 a 9 meses; durante los seis primeros meses se desarrollan rizomas y hojas (Dávila, 2011).

El Ministerio de la Agricultura de Cuba plantea obtener un aumento significativo de este cultivo en su producción en los próximos años, con la finalidad de satisfacer las demandas

crecientes del mismo. Además, las características agrícolas de la malanga, ha contribuido al desarrollo de su cultivo en el país, hasta adquirir su importancia económica (MINAG, 2018). En este sentido se destacan los aspectos siguientes: un alto potencial de rendimiento (60t/ha^{-1}); resistencia a plagas y enfermedades; alto poder de conservación en condiciones naturales; y el tamaño extremadamente pequeño del grano de almidón de 1 a 3 μm (Milián, 2018).

1.1.2 Principales países productores a nivel mundial

La producción mundial de malanga según (FAO, 2014b) fue de 4 000 000 t, y las zonas de producción más importantes son la central y occidental de África Tropical, América Central y Oceanía como se muestra en la Figura 1. Destacándose en la región de América Central los países de Costa Rica, Nicaragua, Ecuador y República Dominicana.

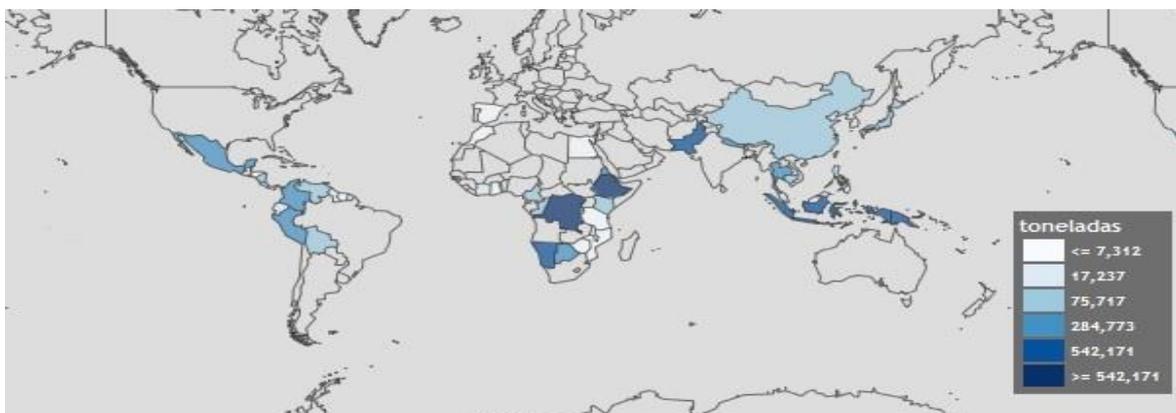


Figura 1. Producción de malanga a nivel mundial

El volumen total que importan los Estados Unidos fluctúa alrededor de 180,000 toneladas por año y otra cantidad considerable por parte de Canadá, debido a la gran cantidad de inmigrantes de origen asiático (Palacios y Álvarez, 2011). Por otro lado, las perspectivas de introducción del producto en la industria alimenticia europea son altas; sin embargo, se requiere aún mucho trabajo de capacitación de productores y definición de vías de comercialización.

Estados Unidos es el principal punto de desembarque de la malanga ecuatoriana (Velasco, 2017). El 52,2% de la producción nacional de malanga se despacha a Norteamérica, según cifras del Ministerio de Comercio Exterior.

1.1.3 Importancia de la malanga y principales usos

La Malanga es uno de los alimentos que posee una gran variedad de propiedades y beneficios si se sabe cómo usarla y con que mezclarla. Se le atribuyen facultades para sanar y para prevenir diversas enfermedades por lo que el conocimiento de todo lo relacionado con ella resulta muy interesante para las personas que quieren comer sano.

Tiene una gran cantidad de fibra dietética lo cual es muy útil pues con solo utilizarlo en una porción de comida se obtiene hasta un 33% de la que es necesario consumir de ese elemento. Sus beneficios se extienden a diversos elementos del cuerpo porque facilita el paso de otros alimentos, reduce la posibilidad de estreñirse y da más rapidez al sistema digestivo en general. Por lo que se considera que un buen sistema digestivo puede ser una consecuencia del consumo de Malanga, además, es bueno para las personas que sufre de ardores en el estómago, los cuales puede ayudar a aliviar en determinados casos (Espinosa *et al.*, 2017).

Este rizoma contiene grandes cantidades de fibra dietética, la cual ayuda a regular y acelerar el proceso digestivo y a disminuir el colesterol en el cuerpo. Además, la digestión de la malanga requiere una cantidad menor de ácidos estomacales en comparación con otros rizomas, lo cual ayuda a disminuir la sensación de ardor en el pecho y la garganta, asociados con la enfermedad de reflujo gastroesofágico. Así mismo, su contenido de sodio es muy bajo y no posee colesterol, por lo cual incluirla en la dieta diaria, constituye una excelente manera para evitar el riesgo de adquirir enfermedades cardiacas, presión sanguínea alta o problemas de sobrepeso (Chamizo, 2014).

Puede ser preparada y consumida de muchas maneras. Por lo general se utiliza cocida para acompañar platos principales y especialmente en la cocina cubana, es habitual comerla con mojo. También se puede utilizar para preparar harina, cremas, frituras, puré o en hojuelas fritas como reemplazo de las papas chips (Qualitradex, 2013).

Otra forma muy sabrosa de consumir malanga es agregarla a las sopas y los guisos, ya que combina muy bien con otros vegetales y las carnes. Incluso en algunas regiones se elaboran postres a base de taro, y se preparan infusiones con sus hojas. No se debe consumir cruda ya que esta planta contiene cristales de oxalato de calcio, similares a agujas microscópicas, que pueden provocar irritación extrema en la garganta (Leyva, 2018).

Por otra parte, según Guzmán *et al.* (2018), la malanga también es utilizada en la elaboración de productos derivados de la carne como los embutidos, en los cuales se utilizan altas dosis de conservantes como método y estrategia para la conservación de la carne fresca que será consumida luego de un periodo de tiempo. En estos casos, se ha visto la necesidad de ir sustituyendo los compuestos químicos, por otros de origen natural que aseguren obtener productos de excelente calidad, como es el caso de la harina de malanga que cumple la función de agente ligante en los embutidos, al ser un compuesto natural, asegurando a los consumidores de los productos cárnicos un alimento completo tanto en requerimientos nutricionales, como en el cuidado de su salud y el de su familia.

1.1.4 Composición química y nutricional

La malanga tiene un alto contenido de tiamina, riboflavina, vitamina C y hierro. Es un excelente alimento por su contenido de proteína del producto húmedo que es de 1.7 a 2.5% (Martínez y González, 2007). Es una planta conocida por más de 3 generaciones, la parte comestible es el tallo subterráneo, rizoma, y es un cultivo resistente en épocas de sequía.

Revisando los valores nutricionales (Tabla 1) de la malanga, se observa que los rizomas se pueden considerar como un alimento esencialmente energético, los rizomas cocidos de malanga en 100 g tienen 142 calorías (Pacheco Varas *et al.*, 2009).

Tabla 1. Composición nutricional por cada 100 g de porción comestible de rizoma crudo fresco Malanga (*Colocasia esculenta*) (FAO, 2002).

Agua (g)	70,3
Azúcar	0,5
Proteínas (g) 1%	0,5
Grasas (g)	0,1
Cenizas (g)	1,3
Energía (kcal)	114,0
Carbohidratos (g) 12%	34,6
Calorías	142,0
Colesterol (mg)	0
Calcio (mg)	20,0
Fósforo (mg)	110,0
Fibra dietética (g) 20%	5,1
Hierro (mg)	2,4
Vitamina A	20,0
Vitamina C	80,0
Tiamina (mg)	0,11
Riboflavina (mg)	0,02
Sodio (mg) 1%	0,15
Niacina (mg)	0,8

Los minerales son tan importantes como las vitaminas para lograr el mantenimiento del cuerpo en perfecto estado de salud (ZonaDiet, 2016). El organismo no puede fabricarlos y por tanto debe utilizar las fuentes exteriores de los mismos, como son los alimentos, los suplementos nutritivos, la respiración y la absorción a través de la piel, para poder asegurar un adecuado suministro de ellos. Después de la incorporación al organismo, los minerales no permanecen estáticos, sino que son transportados a todo el cuerpo y eliminados por excreción, al igual que cualquier otro constituyente dinámico.

1.2 Técnicas y métodos para determinar la concentración de minerales de un cultivo

Cualquiera que sea la técnica o el método elegido para un análisis determinado deberá tener como principios generales: ser el adecuado a fin, para el que se requieren los resultados; que cuando se aplique un método de análisis a materiales de ensayo, deberán conocerse sus características de rendimiento en el laboratorio; deberá vigilarse de modo constante y llevar asociados procedimientos de control de calidad. Además, el analista deberá haber demostrado su competencia al respecto y con pruebas documentales de que todos estos principios se respetan.

Para la determinación de concentración de minerales en un cultivo se utilizan técnicas destructivas y no destructivas. Para obtener resultados precisos y exactos en las mismas, se debe controlar cuidadosamente las siguientes etapas durante el análisis:

- Recolección de la muestra
- Pretratamiento de la muestra
- Descomposición de la muestra
- Validación de los métodos y datos analíticos
- Análisis instrumental

El muestreo es una etapa muy crítica del proceso de análisis debido a que los errores que se cometen en esta etapa pueden comprometer seriamente los resultados obtenidos posteriormente mediante métodos analíticos sofisticados. A menudo los alimentos no son homogéneos, por lo tanto, el tamaño de la muestra debe escogerse cuidadosamente a fin de obtener una muestra representativa (Kastenmayer, 2018). Se deben tomar precauciones para evitar la contaminación durante el muestreo y el material complementario al muestreo (por ejemplo: cuchillos, cucharas, etc.) deberá ser de material inerte como titanio, teflón o polietileno.

Dentro de los métodos espectroscópicos, no sólo siguen desarrollándose los métodos clásicos (espectroscopia óptica), sino que aparecen nuevos métodos (espectroscopia de rayos infrarrojos, métodos de luminiscencia, espectroscopia Raman, resonancia spin-electrónica, etc). Estas técnicas espectroscópicas permiten conocer la composición, la naturaleza del color de los minerales, así como resolver numerosos problemas mineralógicos y físicos. El uso actual amplía el significado de espectroscopia para incluir estudios con otros tipos de radiaciones no electromagnéticas: con iones (espectroscopia de masas), electrones (espectroscopia de electrones) y ondas de sonido (espectroscopia acústica). Los primeros instrumentos espectroscópicos se desarrollaron para utilizarse en la región visible y, por tanto, se denominaron instrumentos ópticos. Hoy en día, este término se ha ampliado con el fin de incluir también a los instrumentos diseñados para las regiones ultravioleta e infrarroja; aunque la terminología no es estrictamente correcta, sirve, sin embargo, para subrayar los numerosos aspectos comunes a los instrumentos usados en estas tres importantes regiones espectrales (Melgarejo *et al.*, 2010).

1.2.1 Técnicas destructivas

Las técnicas destructivas como lo indica su nombre, son pruebas que deforman al material o producto parcial o totalmente. Se identifican comúnmente con las siglas: PD, pruebas destructivas; y se consideran sinónimos a: ensayos destructivos (ED), inspecciones destructivas y exámenes destructivos.

Los atributos internos de las frutas se determinan generalmente con métodos analíticos destructivos como los análisis químicos, la refractometría, el uso de penetrómetros y texturómetros, en muestras representativas por lote, pero su efectividad puede verse limitada por la alta variabilidad en la calidad interna, entre piezas del producto de una misma especie o variedad (González, 2012a).

1.2.2 Técnicas no destructivas

Se denomina técnicas no destructivas a cualquier tipo de prueba practicada a un material o producto que no altere de forma permanente sus propiedades físicas, químicas, mecánicas o dimensionales. Las técnicas no destructivas implican un daño imperceptible o nulo. Los diferentes métodos de técnicas no destructivas se basan en la aplicación de fenómenos físicos tales como ondas electromagnéticas, acústicas, elásticas, emisión de partículas subatómicas, capilaridad, absorción y cualquier tipo de prueba que no implique un daño considerable a la muestra examinada (Lñiguez, 2007).

1.3 Elementos de la espectroscopia vis-NIR

La espectroscopia es la herramienta más utilizada en investigación, análisis, control y diagnóstico en muchos ámbitos relacionados con la física, la química, las ciencias biológicas y las ciencias médicas. Nuevas tecnologías surgen constantemente gracias a los avances en el diseño de fuentes de radiación y detectores, así como dispositivos y sistemas electrónicos cada vez más compactos, rápidos y eficientes (González y Montaña, 2015).

Con la construcción en 1930 del primer prototipo de espectrofotómetro IR se inició un interés creciente por la espectroscopia infrarrojo, siendo la técnica espectroscópica más usada en análisis. La espectroscopia infrarrojo cercano (NIR, por su sigla en inglés) es un método espectrofotométrico que trata con las interacciones de radiación de infrarrojo cercano con la muestra. Se basa en la absorción de radiación electromagnética de longitudes de onda en el rango de 780-2500 nm (Rodríguez *et al.*, 2016). La absorción de radiación infrarroja depende sobre el cambio neto en el momento dipolar de la molécula como consecuencia de su movimiento vibracional.

El descubrimiento de la región espectral de infrarrojo cercano se atribuye a Sir William Herschel, cuando en 1800 haciendo pasar la luz solar por un prisma tomó la temperatura de

la región contigua a la zona rojiza del espectro visible. El termómetro demostró la existencia de una forma de luz invisible más allá del color rojo. El desarrollo y aplicación de métodos espectroscópicos para la resolución de problemas analíticos se demoró algunos años, debido a las características espectrales de lo que se conoce hoy en día como región NIR (Near InfraRed). No fue hasta 1881 cuando Abney y Festing documentaron los primeros espectros NIR de líquidos orgánicos en el intervalo espectral de 700 a 1200 nm. Las primeras aplicaciones analíticas se desarrollaron en la década de los 50 en el siglo XX, como consecuencia de la aparición de los primeros espectrofotómetros comerciales. En 1954, Wilbur Kaye, presentó su trabajo en el cual se registraron espectros de diferentes líquidos orgánicos entre 700 y 3500 nm, asignando los grupos funcionales de la molécula a las diferentes bandas (Peguero, 2010).

El primer impulso importante no fue hasta la década de los 60, cuando Karl Norris empezó a usar esta técnica para el estudio de matrices complejas de origen vegetal. Sus trabajos se orientaron en el campo agroalimentario e impulsaron el interés por la espectroscopia NIR. Los avances en el campo de la electrónica y la óptica proporcionaron, a partir del año 1970, la aparición de nuevos instrumentos que permitirían el registro de espectros completos, con una mayor rapidez y reproducibilidad (Malley, 1998).

Hoy en día la espectroscopia en el Infrarrojo Cercano, NIR, es una técnica analítica usada en la determinación de atributos de índole cualitativo y cuantitativo aplicada a una gran variedad de sectores productivos, y una alternativa a los análisis tradicionales de laboratorio para el control de calidad de alimentos (Naes *et al.*, 2002).

La tecnología NIR se basa en la emisión de un haz de luz sobre la muestra a analizar, la cual en función de su composición, o mejor aún, de la naturaleza de los enlaces presentes en sus moléculas, fundamentalmente de aquellos de tipo $-CH$, $-NH$ y $-OH$, interaccionará

con ellos absorbiendo una determinada cantidad de radiación electromagnética en el rango del infrarrojo cercano, de 780 a 2500 nm (Shenk y Westerhaus, 1995).

Las bandas más frecuentes en NIR son debidas a enlaces que contienen átomos con diferencias de peso molecular importantes, de manera que se aumentan la anarmonicidad del enlace. Algunos ejemplos son C-H, N-H, O-H o S-H como se puede observar en la Figura 2.

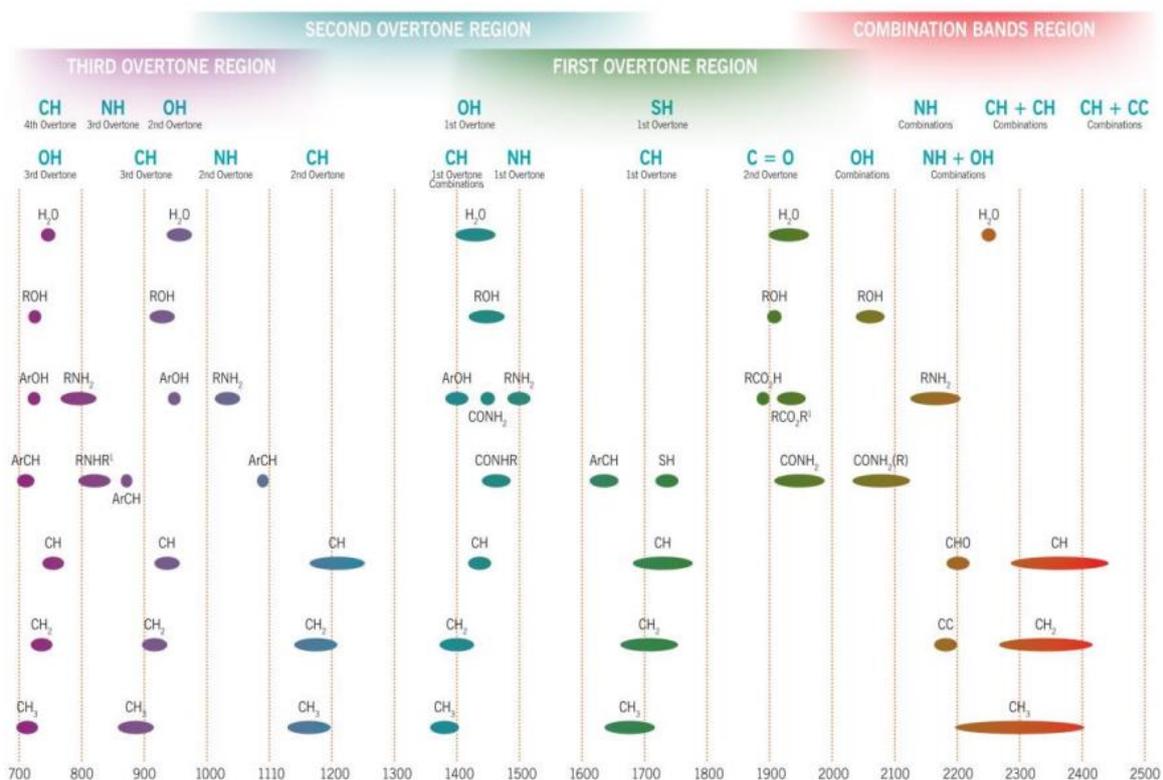


Figura 2. Asignación de bandas NIR a grupos orgánicos

El sistema NIR puede implementarse para su uso en forma cualitativa o cuantitativa, ejemplo de ello es el estudio realizado por Cozzolino (2002), con 400 muestras de alimentos para animales, donde se encontraron coeficientes de determinación mayores a 0,8 para la relación entre varias propiedades medidas por métodos estándar y los valores para esas mismas propiedades obtenidos espectroscópicamente. Aunque en ese estudio se

utilizó un rango de longitud de onda que cubre el visible e infrarrojo cercano (400-2.500 nm), se demuestra las posibilidades de esta técnica (Pérez *et al.*, 2014).

La región del infrarrojo comprende el intervalo espectral de 780-10⁶nm. Según el fenómeno espectroscópico que provoca la absorción de energía por parte de la materia, podemos dividir esta región en tres zonas: 1) infrarrojo cercano 780-2500 nm (NIR), 2) medio 2500-4*10⁴ nm (MIR) y 3) lejano 4*10⁴-10⁶ (FIR). La absorción en el infrarrojo lejano se debe a las rotaciones moleculares, mientras que en el medio proviene de las vibraciones moleculares fundamentales. En el infrarrojo cercano se debe a los armónicos y bandas de combinación de las vibraciones fundamentales de las moléculas (Flores, 2009).

Una característica de la zona de infrarrojo cercano es que las interacciones entre moléculas, como puentes de hidrogeno, entre otras, afectan al espectro NIR, por lo que también incorpora información sobre la estructura cristalina de las sustancias.

Los instrumentos NIR permiten registrar el espectro, tanto de muestras sólidas, líquidas o gaseosas. La versatilidad en cuanto al tipo de producto y atributo a medir es una de las características de la tecnología NIR. La variabilidad en la presentación de la muestra conlleva que exista una gran variedad de accesorios para presentar la muestra al instrumento. En función de la naturaleza y tipo de producto puede ser más apropiado un modo de análisis u otro (Camacho, 2013).

La Figura 3 muestra a cuatro modos principales de análisis NIR: transmitancia, reflectancia, transflectancia, e interactancia (Flores, 2009). La ubicación de los detectores con respecto a la muestra determinará si el equipo trabaja en transmitancia, reflectancia, o combinaciones de éstas.

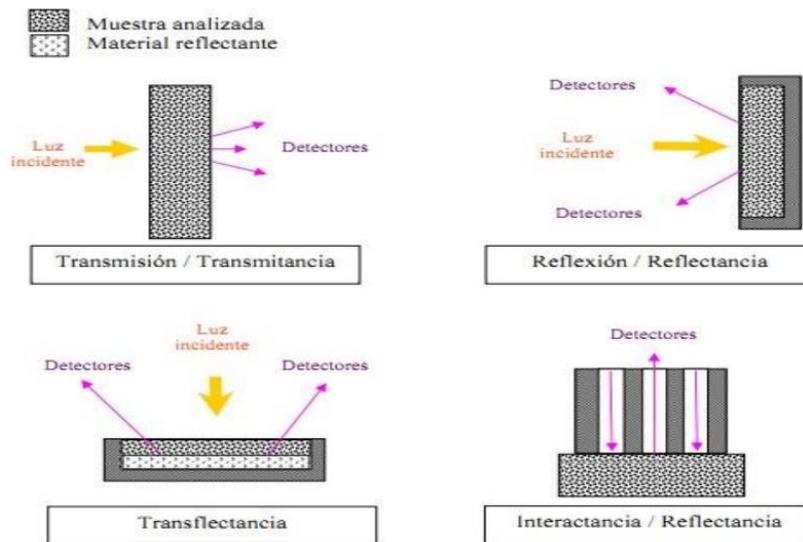


Figura 3. Formas de análisis NIR de los productos agroalimentarios

En transmitancia, la radiación NIR atraviesa la muestra, interactuando en su camino con las moléculas que la componen, siendo una parte absorbida por ellas. La energía que no es absorbida pasa de largo y es cuantificada por los detectores ubicados detrás de la muestra. El uso más común de este sistema es para analizar sólidos de baja densidad, muestras líquidas y semilíquidas.

En reflectancia, el haz de luz se difunde por la muestra irradiada, la radiación penetra en ella (normalmente unos mm), interactuando con las partículas y siendo selectivamente absorbida. La energía que no se absorbe es reflejada y puede ser cuantificada por detectores situados en el mismo plano que la muestra. Este sistema es el más común para muestras sólidas y semisólidas, que forman una barrera difícil de atravesar en transmitancia.

La transflectancia o doble transmisión es una combinación de la transmisión y la reflexión, desarrollada por Technicon para el equipo InfraAlyser. La luz es transmitida a través de la muestra (generalmente líquidos), ésta se dispersa llegando hasta el fondo de la cubeta, el

cual tiene un material totalmente reflectante (aluminio u oro) y regresa al detector que se encuentra en paralelo con la muestra, en modo reflectancia.

La interactancia fue desarrollada por Karl Norris para estudiar plantas vivas y tejidos humanos (NC-ISO 1842, 2001). El modo de actuación consiste en que sondas de fibra óptica concéntricas se disponen de tal modo que el exterior de la mismas es por donde se ilumina la muestra y el interior de la sonda por el que se devuelve la energía reflejada de la muestra. Para la recogida del espectro NIR, la sonda debe estar en contacto con la superficie de la muestra.

1.4 Análisis quimiométrico de datos espectroscópicos vis-NIR

La espectroscopia vis-NIR es una técnica ampliamente usada como método de análisis cuantitativo y cualitativo, para lo cual es necesario el desarrollo de modelos de predicción.

El modelo quimiométrico relaciona la información espectral de las muestras que constituyen el colectivo de aprendizaje con sus valores para el parámetro en estudio, proporcionados por un método de referencia. Una vez desarrollado el modelo, éste permite predecir el contenido de otras muestras de características similares a las incluidas en el grupo de entrenamiento o calibración.

El modelo puede ser bastante complejo, dado que el espectro recogido en la zona del infrarrojo cercano es altamente variable, y contiene información físico-química de la muestra. Cada espectro vis-NIR contiene una importante cantidad de información, en muchos casos redundante, con superposición de bandas de absorción a lo largo de todo el espectro, lo que dificulta en muchos casos la extracción de información. Ello implica que en la región vis-NIR sea difícil encontrar longitudes de onda específicas, y que sea necesario recurrir a métodos de calibración multivariantes, es decir, basados en la combinación de las absorbancias a varias longitudes de onda (Naes *et al.*, 2002).

Para extraer la información química relevante de cada muestra es necesario recurrir al uso de pre-tratamientos de la señal espectral, que permiten separar la información meramente química de las variaciones de origen físico (textura, tamaño, geometría de las partículas, entre otros.).

Los pre-tratamientos más tradicionalmente utilizados son la derivación, y los tratamientos de corrección del efecto “scatter” o radiación dispersa denominados corrección multiplicativa del efecto del scatter, Standard Normal Variate (SNV) y Detrend (DT).

Después de los pre-tratamientos de la señal espectral, los siguientes pasos están orientados a desarrollar una ecuación de calibración capaz de predecir parámetros de calidad de otras muestras con características similares a las incluidas en el colectivo de aprendizaje.

Un buen método de calibración debe satisfacer una serie de requerimientos. En primer lugar, los modelos matemáticos aplicados deben realizar una estimación eficiente y, por otro lado, resolver el problema de colinealidad, que es bastante acusada cuando se trabaja con información espectroscópica NIRS, provocando la inestabilidad de las predicciones. A su vez, los datos de referencia de las muestras obtenidos por laboratorio deben ser lo más precisos posibles, ya que los resultados obtenidos por un método secundario como NIRS tendrán una precisión similar al del método de análisis convencional usado como referencia y que dio origen a la calibración.

Disponer de un colectivo de calibración que aporte variabilidad, es tal vez uno de los factores más importantes en el desarrollo de ecuaciones NIR. La variabilidad, en lo posible debe ser tanto espectral como física y química, similar a la que se espera posteriormente encontrar en el análisis de rutina diario de nuevas muestras. La selección de muestras para constituir el colectivo de calibración puede ser realizada a través del uso de herramientas matemáticas diseñadas para la estructuración de la población y la selección de muestras

representativas del colectivo. Estos procedimientos previos se realizan para definir el colectivo de calibración, ya sea para la construcción de ecuaciones de calibración (análisis cuantitativo) como para modelos de clasificación (análisis cualitativo).

Para el desarrollo de una calibración existen diferentes métodos de regresión, siendo los más utilizados en las aplicaciones cuantitativas NIR la Regresión Lineal Múltiple (RLM o MLR), la Regresión por Componentes Principales (RCP o PCR), la Regresión mediante Mínimos Cuadrados Parciales (RMCP o PLS) y la Regresión mediante Mínimos Cuadrados Parciales Modificada (RMCPM o MPLS), siendo éstas dos últimas las más empleadas en aplicaciones agroalimentarias.

El método de regresión MPLS es una variante del PLS y aporta la ventaja de la estandarización, es decir, que los residuos NIR a cada longitud de onda, son divididos por la desviación estándar de los residuales a esa longitud de onda, antes de calcular el siguiente factor. Se dice que este método es a menudo más estable y preciso que el algoritmo PLS, siendo el número de factores de la regresión seleccionado por validación cruzada. La validación cruzada es un algoritmo que selecciona diferentes colectivos de calibración y validación dentro de una población específica. El procedimiento consiste en dividir el colectivo de calibración en grupos (dependiendo del número de muestras). Cada grupo de validación es predicho una vez con la ecuación desarrollada a partir del resto de grupos. El procedimiento se repite hasta que todas las muestras hayan sido predichas una vez. Este procedimiento además previene el sobreajuste del modelo. Los errores de la misma son evaluados mediante el estadístico Error Típico de Validación Cruzada (ETVC) que es similar al Error Típico de Predicción (ETP).

El ETP es el estadístico más empleado para estimar la capacidad de predicción de una ecuación de calibración NIRS, entendido también como la desviación típica de las

diferencias, para un colectivo de validación, entre el valor determinado mediante el método de referencia y el valor estimado mediante el análisis NIR.

1.5 Análisis de las investigaciones realizadas sobre el tema objeto de estudio

La determinación no destructiva de la calidad interna de la muestra es un objetivo prioritario en las investigaciones más recientes. La espectroscopia es una técnica ampliamente usada como método de análisis cuantitativo y cualitativo, para lo cual es necesario el desarrollo de modelos de predicción (Nicasia *et al.*, 2011).

Es a partir de los años ochenta, y sobre todo en los noventa, cuando esta tecnología ha experimentado un mayor desarrollo y sus aplicaciones se han extendido a nuevos campos, gracias a la labor investigadora llevada a cabo en diferentes países (McClure, 2003). Definida como una técnica no destructiva alternativa a los métodos tradicionales de análisis, la espectroscopia es una técnica, rápida, de gran precisión y exactitud, siempre que se sigan los procedimientos adecuados para generar los modelos de predicción requeridos (Martens y Naes, 1989).

El análisis espectroscópico ha crecido en popularidad debido a su capacidad de proporcionar rápidamente una información cualitativa y cuantitativa de muchos productos. Las características no invasivas ni destructivas de esta técnica, la hacen una nueva herramienta para la garantía de la calidad de línea (Silva y Valverde, 2010). Es por ello que es una técnica muy utilizada y se ha hecho obligatorio e imprescindible su estudio por profesionales e investigadores.

En el sector de productos agrícolas, la espectroscopia ha sido empleada con el fin de desarrollar modelos de predicción de parámetros de calidad interna como el contenido en minerales, sólidos solubles totales, acidez, firmeza, contenido en sacarosa, fructosa, sorbitol, clorofila A, ácido málico, etc., en diferentes alimentos, como recogen los distintos

trabajos de revisión publicados (Nicolai *et al.*, 2007; Saranwong y Kawano, 2007). Así mismo, dicha tecnología ha sido aplicada con el objeto de determinar fecha de recolección, evolución de la calidad en campo y en poscosecha, genotipo, variedad, defectos internos, presencia de hongos y levaduras, entre otros (Saranwong *et al.*, 2004; Peirs *et al.*, 2005; Delwiche *et al.*, 2008)

Actualmente, la utilización de la tecnología NIR a medidas no destructivas de la calidad de rizomas está en desarrollo. Los instrumentos disponibles comercialmente para estas aplicaciones son pocos y de tecnología constructiva diversa, requiriéndose la evaluación científica de modelos predictivos para la medida de los parámetros más importantes de la calidad interna de estos. Según (Valcárcel, 2009) la espectroscopia es una técnica prometedora para la predicción de la composición de sustancias químicas de diversa naturaleza implicadas en la calidad interna. Además de tratarse de una técnica rápida y no destructiva que permite predecir en campo con un error razonable, por lo que es muy útil para realizar una primera preselección cuando se trabaja con un número elevado de muestras. (González, 2012b) desarrolló modelos NIR precisos y robustos destinados a la determinación de los principales parámetros de calidad interna (contenido de sólidos solubles y en azúcares reductores, pH, acidez titular, contenidos en ácido tartárico, ácido málico, y en potasio) de uvas de vinificación durante su maduración en campo, en el momento de cosecha y en su recepción en bodega, utilizando el racimo como forma de presentación de muestra a los instrumentos, con el fin de permitir a los agricultores y bodegueros, el uso rutinario de la tecnología NIR en la industria vitivinícola para predecir con mayor precisión el momento óptimo de vendimia y la calidad inicial de las uvas a su llegada a la industria, garantizando así la más alta calidad posible tanto de la uva como del vino a elaborar.

Capítulo II



Capítulo II. Materiales y Métodos

2.1 Metodología para la selección de las muestras

El presente trabajo de investigación se desarrolló en el Departamento de Ingeniería Agrícola de la Facultad de Ciencias Agropecuarias de la Universidad Central “Marta Abreu” de Las Villas (UCLV), en el período comprendido de septiembre 2016 a mayo del 2018. Se seleccionaron los cultivares de malanga “morada” 204, 206 y 207 para dar cumplimiento a los objetivos ya que son de origen cubano, procedente del Instituto de Investigaciones de Viandas Tropicales (INIVIT), institución científica perteneciente al Ministerio de la Agricultura (MINAG) ubicada en el municipio de Santo Domingo de la provincia Villa Clara. En el diseño experimental las muestras seleccionadas como población inicial fueron cosechadas por el INIVIT, dedicado por más de 45 años a la investigación, desarrollo y producción de semillas en viandas tropicales y fruta bomba. Es, además, el centro responsabilizado en la conservación, ampliación y caracterización de los recursos fitogenéticos de todas las especies de raíces, rizomas y tubérculos.

Los rizomas se lavaron con agua potable a presión y se almacenaron a una temperatura de refrigeración aproximada de 4-5 °C hasta su utilización. Luego, estas muestras se subdividieron en subgrupos de acuerdo al tipo de cultivar y para su análisis se trasladaron a los laboratorios de la Facultad de Ciencias Agropecuarias perteneciente a la UCLV por el método convencional utilizado en el laboratorio químico del Centro de Investigaciones Agropecuarias (CIAP).

2.2 Metodología para el cálculo de la muestra

Para el cálculo de la muestra se realizó un pre-experimento con un total de 20 muestras de malanga tomadas al azar, calculándose la media y la varianza de las variables analizadas,

y luego mediante la ecuación citada por (Carballo y Prado, 1980) se calculó la muestra, con un error de la media de 0,05 y un nivel de confianza del 95%.

$$n = (t^2 \cdot \sigma^2) / \Delta^2 \quad (\text{Ecuación 1})$$

Donde:

n - tamaño de la muestra

t² - criterio de Student

σ² - varianza

Δ² - error de la media

2.3 Metodología para el análisis de minerales por la técnica de espectroscopia de absorción atómica

Para la determinación de los análisis realizados en el laboratorio se utilizó la técnica de absorción atómica, la cual se basa en la destrucción de la materia orgánica por vía seca hasta lograr la digestión de la muestra para posteriormente disolver los residuos con ácido nítrico diluido.

La determinación de la concentración de los minerales por la técnica de absorción atómica se llevó a cabo mediante el procedimiento descrito por (Márquez, 2009):

- ✓ Se realiza el pesaje de crisoles vacíos (utilizando para ello la balanza analítica)
- ✓ Se vierten 2 g de muestra húmeda en cada crisol
- ✓ Poner en la estufa los crisoles a 105°C durante 24 horas para secar la muestra
- ✓ Se realiza nuevamente el pesaje a los crisoles con la muestra seca y se determina el peso de la muestra
- ✓ Poner los crisoles en la mufla a 550°C durante 5 horas
- ✓ Luego se disuelven las cenizas en 20 ml de HCL I:I
- ✓ Poner en la plancha de calentamiento hasta que disminuya el volumen de la disolución
- ✓ Se filtran y se enrazan a 100 ml de H₂O destilada

- ✓ Mediante el espectrofotómetro de absorción atómica utilizando la lámpara de cada mineral se lee cada muestra

Luego mediante la siguiente ecuación se determina la concentración de minerales en cada muestra:

$$\frac{\text{Lectura} \times 100}{\text{Peso Seco}} = (\text{ppm}) \quad (\text{Ecuación 2})$$

2.4 Metodología para la determinación de los espectros de reflectancia

Para el análisis de las muestras, se configuran los espectros de reflectancia vis-NIR, como se observa en la Figura 4. El espectrofotómetro (Corona *plus* distancia vis-NIR Zeiss, Jena, Alemania) se compone de una red de diodos y un cabezal de medición OMK500-H conectado a un haz de fibra óptica.

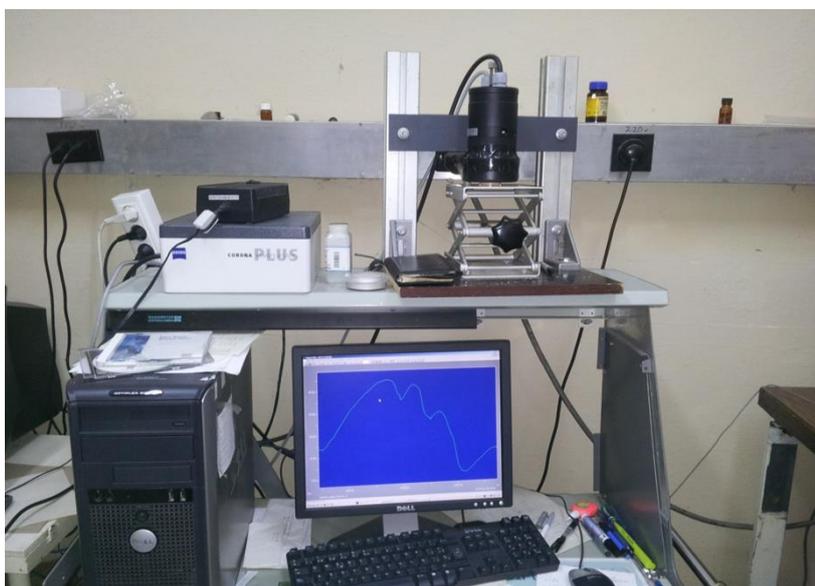


Figura 4. Espectrofotómetro de red de diodos conectado a una PC

El cabezal de medición está diseñado para medir la dispersión en muestras relativamente heterogéneas en el modo de reflectancia difusa. Es adecuado para medir en línea la reflectancia difusa en diferentes muestras, variando de forma continua la distancia entre el

cabezal de medición y la superficie de la muestra. Las especificaciones del OMK 500-H-NIR se resumen en la Tabla 2 (Peguero, 2010). Contiene una lámpara halógena de 10 W, alimentado por una fuente de alimentación de 5 V a través de un cable eléctrico. Un sistema proporciona iluminación óptica de la muestra a 0° en un haz casi paralelo. En el cabezal de medición del color, 15 fibras ópticas individuales están dispuestas de manera uniforme en un anillo de observación de la muestra a 45°.

Tabla 2. Datos técnicos del OMK 500-H-NIR cabezal de la medición

OMK 500 cabezal de medición	Propiedades
Componentes	
Rango espectral	270...1702 nm
Tiempo de medición de la muestra	< 2 s
Rango de la medida	380-1702 nm
% de ruido	$\Delta R < 0.04 \% R$
Sensibilidad variante a la distancia	$X \pm 1 \text{ mm dR} < 0.2 \%$
Tiempo de la integración para la desviación de la balanza llena	< 100 ms
Fuente ligera lámpara de halógeno Estabilizada	5V, 10W,
Vida de la lámpara aprox.	3 000 horas
Conector de fibra	2x Zeiss-conector
Vista geométrica	15 x 24 ° circular bajo 45°
Ángulo iluminado	0°
Tamaño de la mancha	aprox. 20 mm
La longitud de fibra óptica	1 m ... 10 m
Peso	1.3 kg
Dimensiones	100 mm x 100 mm x 197 mm (Lx A x H)
Protección de acercamiento	IP 55

Las fibras se encuentran agrupadas por una guía de luz que está conectado al espectrofotómetro. Además, la conexión de guía de luz para el canal de medición se encuentra en la parte frontal del instrumento. El ordenador (PC) está conectado al espectrofotómetro a través de un Ethernet interfaz. La configuración mínima se determina por el software utilizado (*Aspect-plus* suministrada por Carl Zeiss Jena). No hay operaciones en que se requiera de otro dispositivo, ya que el control se maneja a través del software, en la PC. Varios paquetes de software están disponibles para este sistema de medición.

Todos los espectros se obtuvieron utilizando los mismos ajustes del instrumento: medida en el modo de reflexión, longitud de onda 379 - 1700 nm. Los tiempos de integración fueron: para el vis (143,5 ms) y los NIR (200 ms). Una pequeña cantidad de la muestra (aproximadamente 15 g) se colocó en una placa de *Petri* de 10 mm de profundidad y 35 mm de diámetro. Cada placa de *Petri* con aproximadamente 15 g de la muestra se coloca debajo del sensor en el centro del punto de coordinación. Luego se tomaron tres espectros de reflectancia sobre la zona central de la placa de *Petri*, a una rotación de la muestra de aproximadamente 120°. Los tres espectros de cada muestra se promediaron para obtener un espectro promedio por muestra.

2.5 Metodología para el procesamiento de los resultados

Los valores mínimos, máximos y la media, se compararon según la escala de interpretación del coeficiente de correlación de *Pearson* (Tabla 3). Un coeficiente de correlación, mide el grado de relación o asociación existente generalmente entre dos variables aleatorias (Vinuesa, 2016). Tiene como objetivo medir la fuerza o grado de asociación entre dos variables aleatorias cuantitativas que poseen una distribución normal variada conjunta.

Tabla 3. Escala de interpretación del coeficiente de correlación de Pearson

Valor	Significado
-1.00	Correlación negativa grande perfecta
-0.90 a -0.99	Correlación negativa muy alta
-0.70 a -0.89	Correlación negativa alta
-0.40 a -0.69	Correlación negativa moderada
-0.20 a -0.39	Correlación negativa baja
-0.01 a -0.19	Correlación negativa muy baja
0	Correlación nula
0.01 a 0.19	Correlación positiva muy baja
0.20 a 0.39	Correlación positiva baja
0.40 a 0.69	Correlación positiva moderada
0.70 a 0.89	Correlación positiva alta
0.90 a 0.99	Correlación positiva muy alta
1.00	Correlación positiva grande perfecta

Usando $\rho = +$ la relación es directa entre las variables. Si $\rho = -$ la relación es inversa y si $\rho = 0$ son independientes (Restrepo y González, 2007). Según (Lizama y Boccardo, 2014), si el coeficiente de correlación arrojado va entre 0 y 0.2, entonces la correlación es mínima; si va entre 0.2 y 0.4, es una correlación baja; si va entre 0.4 y 0.6, entonces es una correlación moderada, ya entre 0.6 y 0.8 es una correlación buena; finalmente, entre 0.8 y 1, es una correlación muy buena. Esto mismo aplica en negativo.

Para la correlación de Pearson, un valor absoluto de 1 indica una relación lineal perfecta. Una correlación cercana a 0 indica que no existe relación lineal entre las variables. Un coeficiente bajo no significa que no exista relación entre las variables. Las variables pueden tener una relación no lineal (Minitab, 2017).

Para el procesamiento de los resultados con el espectro, cada lectura del mismo se guardó como un archivo independiente (csv) y, a continuación, fueron transportados para el Excel.

Para realizar estos procesamientos estadísticos se utilizó el software Matlab 7.4, el cual es una herramienta integral de análisis de datos para Estadística Exploratoria, Análisis Multivariado, Clasificación, Predicción y Diseño de Experimentos.

En cada uno de los cultivares se correlacionaron la concentración de los minerales, con la reflectancia espectral de las diferentes muestras por medio del modelo de regresión PLS (Mínimos Cuadrados Parciales). La regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS) parte de la premisa de que la información espectral es función de unas pocas teniendo en cuenta para el cálculo de dichas variables no solo la información espectral sino además el valor de referencia del parámetro medido para cada muestra. Las regresiones PLS tratan de encontrar variables latentes que maximicen la varianza explicada por las variables de predicción (X, en este caso los espectros NIR) que es relevante para predecir la variable respuesta (Y, para nosotros cada una de las variables analíticas medidas).

El método de pre-tratamiento espectral utilizado fue el de Corrección de Señal Multiplicativa (MSC), Primera Derivada de *Savitzky – Golay*, Suavizado y Centrado medio, con el fin de mejorar la capacidad de predicción de los modelos construidos. Los modelos de regresión PLS fueron evaluados con la técnica de validación cruzada (*Leave One Out*), para optimizar la complejidad del mismo.

Capítulo III



Capítulo III. Resultados y Discusión

3.1 Determinación de los minerales y su concentración en los tres cultivares de malanga en estudio

En la Tabla 4 se muestran los análisis estadísticos de las concentraciones de los minerales obtenidos en los cultivares de malanga morada 204, 206 y 207 de cada muestra analizada, utilizando la técnica de espectrofotometría de absorción atómica.

Tabla 4. Valores mínimos, máximos y desviación estándar de los minerales analizados en los cultivares 204, 206 y 207 en el set de calibración.

Estadísticos descriptivos	Ca	Mg	Mn	Cu	Na	K	Fe	Zn
	mg 100 g ⁻¹							
Mín. ^a	0.74	0.86	0.37	0.17	0.11	7.21	2.28	0.91
Mín. ^b	0.70	0.88	0.66	0.34	0.17	13.76	2.42	0.95
Mín. ^c	0.60	0.91	0.41	0.24	0.08	12.3	3.75	1.18
Máx. ^a	1.18	1.95	1.75	0.96	0.36	12.02	4.3	4.13
Máx. ^b	1.92	2.88	2.43	1.56	1.41	19.35	9.35	3.04
Máx. ^c	1.67	1.87	2.52	1.1	1.48	17.11	8.99	4.36
DE. ^a	0.06	0.37	0.39	0.29	0.07	0.34	0.5	0.2
DE. ^b	0.11	0.33	0.44	0.23	0.06	1.54	0.68	0.81
DE. ^c	0.27	0.23	0.74	0.23	0.28	1.6	2.14	1.11

Leyenda: Ca – Calcio; Mg – Magnesio; Mn – Manganeseo; Na – Sodio; Zn – Cinc; Cu – Cobre; Fe – Hierro; K – Potasio; a- Cultivar 204; b- cultivar 206; c- cultivar 207; Mín.^a- valores mínimos en el cultivar 204; Mín.^b- valores mínimos en el cultivar 206; Mín.^c - valores mínimos en el cultivar 207; Máx.^a-valores máximos en el cultivar 204; Máx.^b-valores máximos en el cultivar 206; Máx.^c-valores máximos en el cultivar 207; DE.^a- desviación estándar en el cultivar 204; DE.^b- desviación estándar en el cultivar 206; DE.^c- desviación estándar en el cultivar 207.

En la tabla anterior se observó, el mineral de mayor concentración en los valores mínimos fue el potasio con $13.76 \text{ mg } 100 \text{ g}^{-1}$ en el cultivar 206 y de más baja concentración fue el sodio con $0.08 \text{ mg } 100 \text{ g}^{-1}$ en el cultivar 207. Según (Millán *et al.*, 2009), la ingesta de sodio diaria debería oscilar entre los 500 y los 3000 mg. Sin embargo, en el caso de los pacientes hipertensos deberían consumir menos de 2000 mg de sodio diario.

Para la concentración en los valores máximo se destaca nuevamente el potasio pero esta vez con $19.35 \text{ mg } 100 \text{ g}^{-1}$ en el cultivar 206, siendo de gran importancia, ya que este mineral actúa conjuntamente con el sodio para mantener el equilibrio de líquido corporal, además influyen en la contracción muscular y la excitabilidad de las fibras nerviosas (Bortoni, 2017). Sin embargo, el mineral de más baja concentración fue el sodio con $0.36 \text{ mg } 100 \text{ g}^{-1}$ en el cultivar 204.

Es importante señalar que tanto el cobre como el cinc no se destacan por sus altas concentraciones para los cultivares analizados, sin embargo, el cobre es necesario porque interviene en los procesos de curación, producción de energía, coloración del cabello y la piel. Este mineral también se requiere para la salud de los nervios y de las articulaciones. Por otra parte, la ingestión diaria sugerida de cinc es de 15 a 20 mg al día y en los resultados obtenidos, este mineral ofrece de 0.2 a $4.36 \text{ mg } 100 \text{ g}^{-1}$. Este mineral ayuda al metabolismo de carbohidratos y lípidos; además fortalece el sistema inmunológico, responsable de las defensas del cuerpo (Bortoni, 2017).

En el caso del manganeso (oligoelemento esencial), en estos cultivares solo brinda de 0.37 a $2.52 \text{ mg } 100 \text{ g}^{-1}$. Hay que tener en cuenta que el 86% del mismo, se pierde durante distintos procesos de los alimentos como son: la moderna molturación del trigo; el 89% durante el blanqueado y refinado del azúcar y el 75% en el pulido para blanquear el arroz. Todas estas pérdidas no son luego debidamente remplazadas a través de la alimentación

por lo que es necesario ofrecerle al organismo estos aportes por las bajas concentraciones que presenta en estos casos (ZNDT, 2018).

Los resultados obtenidos en la desviación estándar, nos muestra que el mineral de mayor desviación para los tres cultivares analizados, fue el hierro con 2.14 mg 100 g⁻¹ en el cultivar 207. Este mineral es importante para la oxigenación de todas las células, garantiza el transporte de oxígeno desde los pulmones hacia los otros órganos. Por otra parte, los minerales de menor desviación estándar fueron el calcio con 0.06 mg 100 g⁻¹ en el cultivar 204 y el sodio con el mismo valor, pero en el cultivar 206.

Los coeficientes de variación que se determinaron para los tres cultivares analizados muestran, que el sodio fue el mineral de mayor variación con 76,13% en el cultivar 206 como se ilustra en la Tabla 5.

Tabla 5. Coeficiente de variación de los minerales analizados en los cultivares 204, 206 y 207 en el set de calibración.

Cultivares	Ca	Mg	Mn	Cu	Na	K	Fe	Zn
	%							
204	11.47	24.66	41.33	38.77	31.07	14.87	22.19	34.57
206	29.70	43.71	49.38	41.96	76.13	11.53	45.34	35.17
207	34.50	17.57	53.69	38.41	52.24	11.50	36.27	38.74

Leyenda- Ca – Calcio; Mg – Magnesio; Mn – Manganeso; Na – Sodio; Zn – Cinc; Cu – Cobre; Fe – Hierro; K – Potasio.

También se observó, que el mineral de menor variación fue el calcio con 11,47% en el cultivar 204. Este es un mineral que ayuda principalmente a fortalecer los huesos y dientes, regula los latidos del corazón durante el ejercicio por lo tanto también disminuye la presión arterial y disminuir colesterol. Activa la enzima llamada lipasa que es encargada de descomponer las grasas.

Es necesario conocer que el coeficiente de variación es un índice de variabilidad especialmente útil para comparar variabilidades de características de diferente naturaleza, o de la misma naturaleza en diferentes grupos y nos indica qué tan grande es la desviación estándar. Se utiliza cuando se desea hacer referencia a la relación entre el tamaño de la media y la variabilidad de la variable. A mayor valor del coeficiente de variación, mayor heterogeneidad de los valores de la variable; y a menor C.V, mayor homogeneidad en los valores de la variable. Permite comparar las dispersiones de dos distribuciones distintas, siempre que sus medias sean positivas. La mayor dispersión corresponderá al valor del coeficiente de variación mayor (Pateiro, 2018).

En la Tabla 6 se muestran las comparaciones estadísticas de los cultivares analizados, en los cuales no se observan diferencias significativas entre ellos en relación a las concentraciones de calcio, magnesio, manganeso y cobre. En relación a las concentraciones de sodio, potasio, hierro y cinc el p-valor entre los distintos cultivares da un resultado menor que 0.05, de lo cual se interpreta que si hubo diferencias estadísticas entre ellos.

Tabla 6. Resumen de las comparaciones estadísticas de medias de los minerales por cultivares analizados en el set de calibración.

Cultivar	Ca	Mg	Mn	Cu	Na	K	Fe	Zn
	mg 100 g ⁻¹							
204	0.98a	1.35a	1.08a	0.59a	0.21b	10.38c	3.07b	2.34a
206	1.15a	1.49a	1.28a	0.81a	0.47a	16.72a	4.93a	1.54b
207	1.03a	1.39a	1.59a	0.64a	0.76a	12.55b	6.02a	2.43a
E.E (ȳ)±	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001

* Medias con letras no comunes en la misma columna difieren para Scheffe ($p \leq 0.05$)

Leyenda- Ca – Calcio; Mg – Magnesio; Mn – Manganeseo; Na – Sodio; Zn – Cinc; Cu – Cobre; Fe – Hierro; K – Potasio.

En la Tabla 7 se muestra la correlación de Pearson para los minerales analizados en el set de calibración. Acorde al sistema de clasificación utilizado, las correlaciones positivas grandes perfectas se observaron entre el cobre y el potasio y entre el sodio y el hierro con valor de 1.00.

El manganeso presentó correlaciones positivas muy altas con el sodio y el hierro, e igualmente el cobre y el potasio tuvieron este tipo de correlación con el calcio. Sin embargo, se presentó correlaciones negativas moderadas bajas entre el cobre y el potasio con el cinc y, entre el cinc y el calcio se obtuvo una correlación negativa baja.

Tabla 7. Correlación de Pearson en el set de calibración

	Mg	Mn	Cu	Na	K	Fe	Zn	Ca
Mg		0.78	0.83	0.86	0.87	0.91	0.07	0.96
Mn			0.31	0.99	0.37	0.97	0.68	0.57
Cu				0.44	1.00	0.53	-0.49	0.96
Na					0.50	1.00	0.57	0.68
K						0.59	-0.43	0.97
Fe							0.48	0.75
Zn								-0.21

El valor del coeficiente de correlación fluctúa entre $-1 \leq \rho \leq 1$ y el valor 0 indica que no existe asociación lineal entre las dos variables en estudio (Martínez *et al.*, 2009). Mientras mayor sea el valor absoluto del coeficiente, más fuerte será la relación entre las variables.

En la Tabla 8 se muestran los análisis estadísticos de las concentraciones de los minerales obtenidos en los cultivares de malanga morada para el set de validación.

Tabla 8. Estadísticos descriptivos de los minerales en los cultivares 204, 206 y 207 en el set de validación

Estadísticos descriptivos	Ca	Mg	Mn	Cu	Na	K	Fe	Zn
	mg 100 g ⁻¹							
Mín. ^a	0.88	1.1	0.73	0.22	0.12	11.17	2.58	2.09
Mín. ^b	0.98	0.96	0.66	0.64	0.3	15.2	2.7	1.23
Mín. ^c	0.68	1.29	0.63	0.36	0.43	12.3	3.62	1.7
Máx. ^a	1.07	1.94	1.69	0.95	0.35	12.01	3.78	2.6
Máx. ^b	1.24	2.49	2.37	1.56	1.41	19.08	6.39	1.81
Máx. ^c	1.32	1.86	2.36	0.94	1.13	16.25	8.98	4.36
DE. ^a	0.06	0.37	0.39	0.29	0.07	0.34	0.5	0.2
DE. ^b	0.1	0.66	0.71	0.43	0.52	1.6	1.61	0.26
DE. ^c	0.27	0.23	0.74	0.23	0.28	1.6	2.14	1.11

Leyenda: Ca – Calcio; Mg – Magnesio; Mn – Manganeseo; Na – Sodio; Zn – Zinc; Cu – Cobre; Fe – Hierro; K – Potasio; a- Cultivar 204; b- cultivar 206; c- cultivar 207; Mín.^a- valores mínimos en el cultivar 204; Mín.^b- valores mínimos en el cultivar 206; Mín.^c - valores mínimos en el cultivar 207; Máx.^a-valores máximos en el cultivar 204; Máx.^b-valores máximos en el cultivar 206; Máx.^c-valores máximos en el cultivar 207; DE.^a- desviación estándar en el cultivar 204; DE.^b- desviación estándar en el cultivar 206; DE.^c- desviación estándar en el cultivar 207.

En los resultados obtenidos de los análisis estadísticos en el set de validación se observó, que el mineral de mayor concentración en los valores mínimos fue nuevamente el potasio con 12.3 mg 100 g⁻¹ pero en este caso para el set de validación fue en el cultivar 207 y el de más baja concentración se reitera el sodio con 0.3 mg 100 g⁻¹ en el cultivar 206. También, en el caso de la concentración en los valores máximos se destaca el potasio con

19.08 mg 100 g⁻¹ en el cultivar 206 y el de más baja concentración fue el sodio con 0.35 mg 100 g⁻¹ en el cultivar 204. Por lo que estos resultados demuestran reiteradamente las altas concentraciones para el potasio para ambos rangos (mín. – máx.), además de las bajas concentraciones para el sodio en los mismos.

El mineral de mayor desviación estándar fue el hierro con 2.14 mg 100 g⁻¹ en el cultivar 207 reiterándose este resultado en el set de calibración, de igual modo sucede con el calcio que fue el mineral de menor desviación estándar con 0.06 mg 100 g⁻¹ en el cultivar 204.

El sodio obtuvo mayor coeficiente de variación con 68.40% en el cultivar 206 y el menor fue el potasio con 2.91% en el cultivar 204. Destacándose los mismos cultivares y el propio mineral sodio que se obtuvieron en el set de calibración, solo con una disminución del 4.73% de este mineral (Tabla 9).

Tabla 9. Coeficiente de variación de los minerales analizados en los cultivares 204, 206 y 207 en el set de validación.

Cultivares	Ca	Mg	Mn	Cu	Na	K	Fe	Zn
	%							
204	5.99	26.77	3.103	53.44	32.24	2.91	16.46	8.47
206	8.35	38.40	42.93	41.73	68.40	9.12	31.53	17.89
207	24.77	15.51	42.72	32.06	35.37	11.51	32.51	35.06

Leyenda- Ca – Calcio; Mg – Magnesio; Mn – Manganeseo; Na – Sodio; Zn – Cinc; Cu – Cobre; Fe – Hierro; K – Potasio.

Según lo planteado por Pérez (2018), es necesario señalar, que en la malanga dentro de los minerales que se destacan en su aporte es el potasio, por no dejar atrás a otros como lo son: el magnesio, fósforo y manganeso, pero estos últimos no demuestran esos resultados en la tablas anteriores de los estadísticos descriptivos para el set de calibración y de validación.

Los macro nutrientes son los minerales que se necesitan en grandes cantidades (sodio, calcio, potasio, fósforo, azufre y magnesio). Los oligoelementos, son los que se necesitan en pequeñas cantidades (hierro, yodo, flúor, cobre, manganeso, cobalto, zinc, cromo, molibdeno, selenio, etc.). Su carencia o exceso, puede causar enfermedades crónicas que desaparecen al aportarlos o disminuirlos en la dieta, por eso deben estar en concentraciones equilibradas. Deben formar parte de la alimentación diaria ya que son eliminados constantemente y debemos reponerlos (Santana, 2016).

En la Tabla 10 se muestran las comparaciones estadísticas de los minerales por cultivares analizados pero esta vez para el set de validación. En este caso, al igual que para el set de calibración, no se observan diferencias significativas entre estos minerales en relación a las concentraciones de calcio, magnesio, manganeso y cobre. En relación a las concentraciones de sodio, potasio, hierro y cinc el p-valor entre los distintos cultivares nuevamente se obtiene un resultado menor que 0.05, de lo cual se interpreta que si hubo diferencias estadísticas entre ellos.

Tabla 10. Resumen de las comparaciones estadísticas de los minerales por cultivares analizados en el set de validación.

Cultivar	Ca	Mg	Mn	Cu	Na	K	Fe	Zn
	mg 100 g ⁻¹							
204	0.98a	1.37a	1.25a	0.54a	0.23b	11.52c	3.02b	2.35a
206	1.15a	1.71a	1.65a	1.03a	0.76a	17.53a	5.12a	1.48b
207	1.11a	1.5a	1.72a	0.7a	0.8a	13.94b	6.6a	3.17a
E.E (\bar{y})±	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001

* Medias con letras no comunes en la misma columna difieren para Scheffe ($p \leq 0.05$)

Leyenda- Ca – Calcio; Mg – Magnesio; Mn – Manganeso; Na – Sodio; Zn – Cinc; Cu – Cobre; Fe – Hierro; K – Potasio.

En la Tabla 11 se muestra la correlación de Pearson para los minerales analizados en el set de validación. Las correlaciones positivas grandes perfectas se observaron entre el magnesio con el cobre y el potasio; el manganeso con el sodio y; el cobre con el potasio con valor de 1.00. En el caso del magnesio, manganeso, sodio y el potasio presentaron correlaciones positivas muy altas con calcio, además, el manganeso y el sodio tuvieron esta misma correlación con el hierro. Por otro lado, se presentó correlación negativa moderada entre el magnesio, cobre y potasio con el cinc, además de una correlación negativa baja entre el cinc y el calcio, coincidiendo estos resultados con los obtenidos en el set de calibración.

Tabla 11. Correlación de Pearson en el set de validación

	Mg	Mn	Cu	Na	K	Fe	Zn	Ca
Mg		0,70	1,00	0,75	1,00	0,47	-0,63	0,91
Mn			0,65	1,00	0,72	0,96	0,12	0,93
Cu				0,71	1,00	0,41	-0,67	0,88
Na					0,77	0,94	0,05	0,96
K						0,49	-0,61	0,92
Fe							0,40	0,80
Zn								-0,24

3.2 Variabilidad de los espectros de reflectancia vis-NIR en diferentes longitudes de onda

En las Figuras 5, 6 y 7 se muestran una representación gráfica de los espectros de reflectancia de los cultivares de malanga sin cáscara y rallada, en función del rango de longitud de onda en la región vis-NIR.

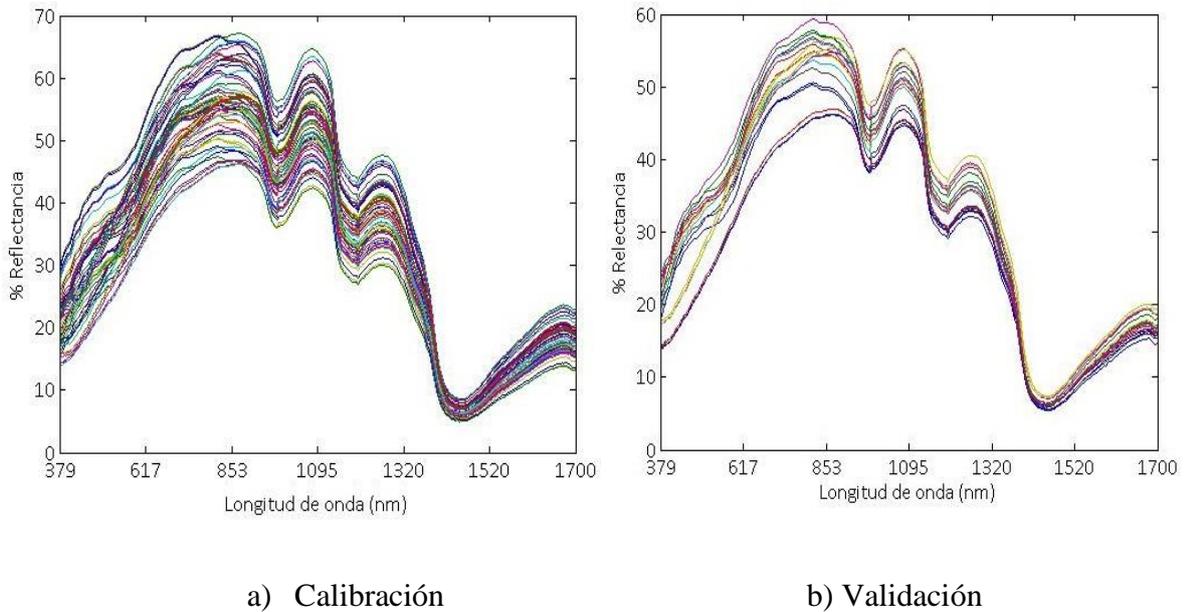


Figura 5. Curvas promedio del espectrofotómetro en el cultivar 204

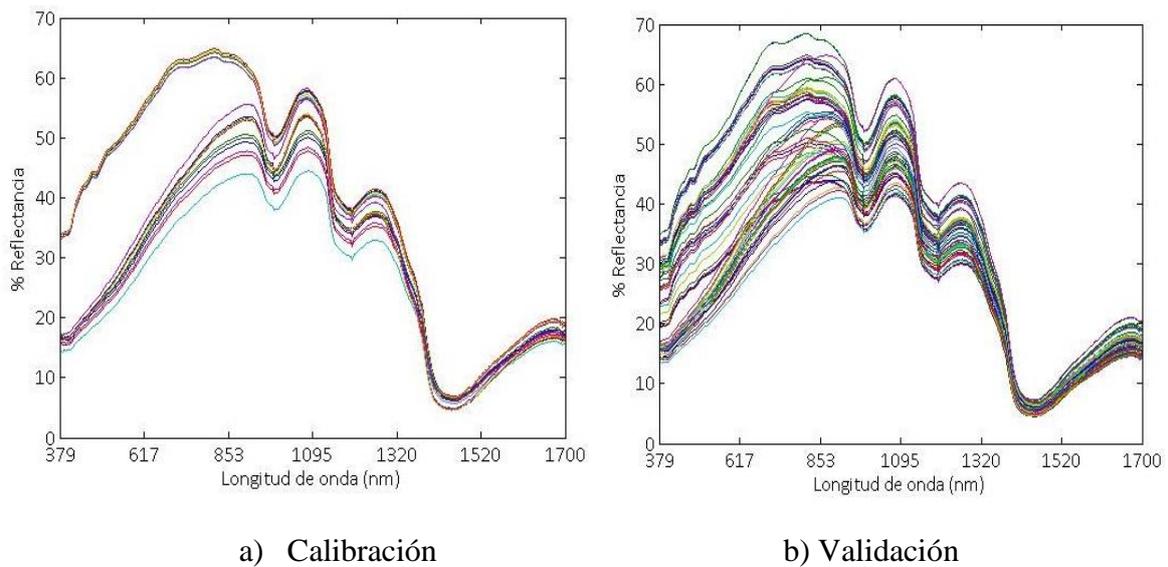


Figura 6. Curvas promedio del espectrofotómetro en el cultivar 206

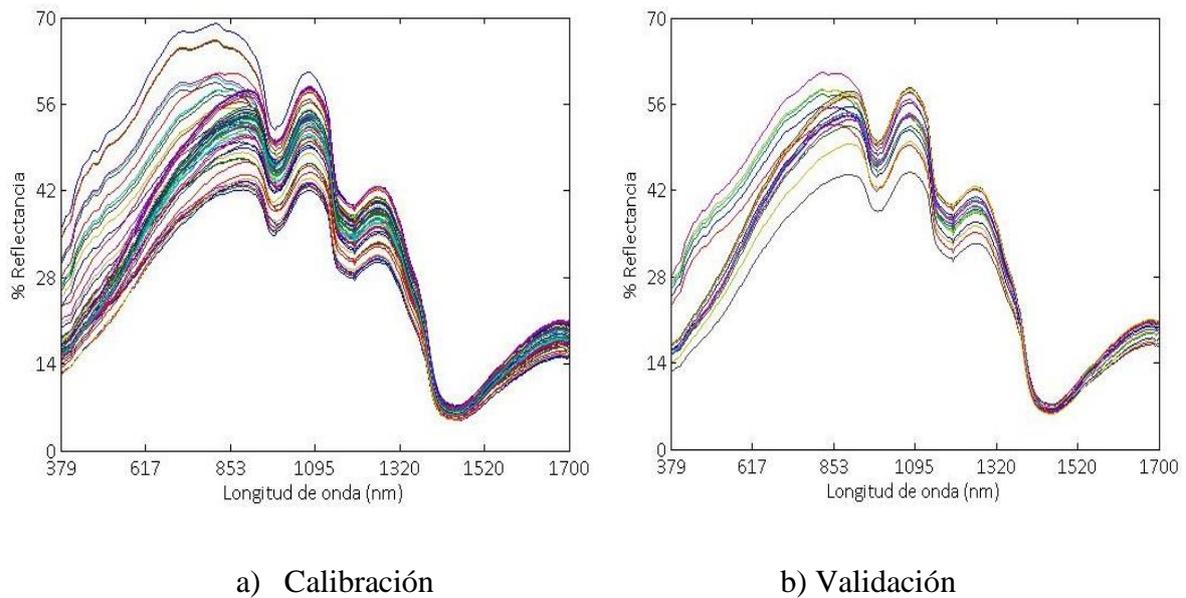


Figura 7. Curvas promedio del espectrofotómetro en el cultivar 207

Se observó que en la región visible del espectro (380 – 780 nm) la reflectancia tiende a ir incrementándose considerablemente hasta aproximadamente los 780 nm. Por otra parte, en la región NIR (780 – 1685 nm), se observó una mayor variabilidad de estos espectros, dado que hubo un pico de decrecimiento alrededor de los 965 nm, para posteriormente incrementarse hacia los 1095 nm, luego decrecer hacia los 1216 nm aproximadamente. Luego sobre los 1293 nm vuelve a incrementarse para luego tener un pico importante decreciente en los 1424 nm aproximadamente donde se observa el % de reflectancia más bajo de todo el espectro en los tres cultivares de malanga morada analizados.

Los picos de reflectancia observados en la región NIR pueden deberse fundamentalmente a los enlaces O-H, C-H y N-H. Esto coincide con lo reportado por Nicola et al. (2007), respecto a que los espectros están dominados por las bandas de absorción del agua, así como por enlaces -OH, fundamentalmente en las longitudes de onda 760 nm y 970 nm. Los picos de decrecimiento observados en el espectro se deben fundamentalmente a las moléculas de H₂O presentes en las longitudes de ondas mencionadas anteriormente según lo descrito por (Peguero, 2010).

3.3 Correlación de la concentración de minerales de los cultivares de malanga en estudio, con las lecturas de reflectancia espectral vis-NIR en diferentes longitudes de onda

En las Figuras 8 y 9 se muestran los modelos PLS que permitieron comparar la precisión de la predicción vis-NIR de la concentración de minerales en el cultivar 204 de malanga morada. Se observó una predicción superior al 70% en las concentraciones de calcio, magnesio, manganeso, cobre, hierro y sodio. En los casos del hierro y el manganeso se observó una predicción muy buena del 92% y del 99% respectivamente.

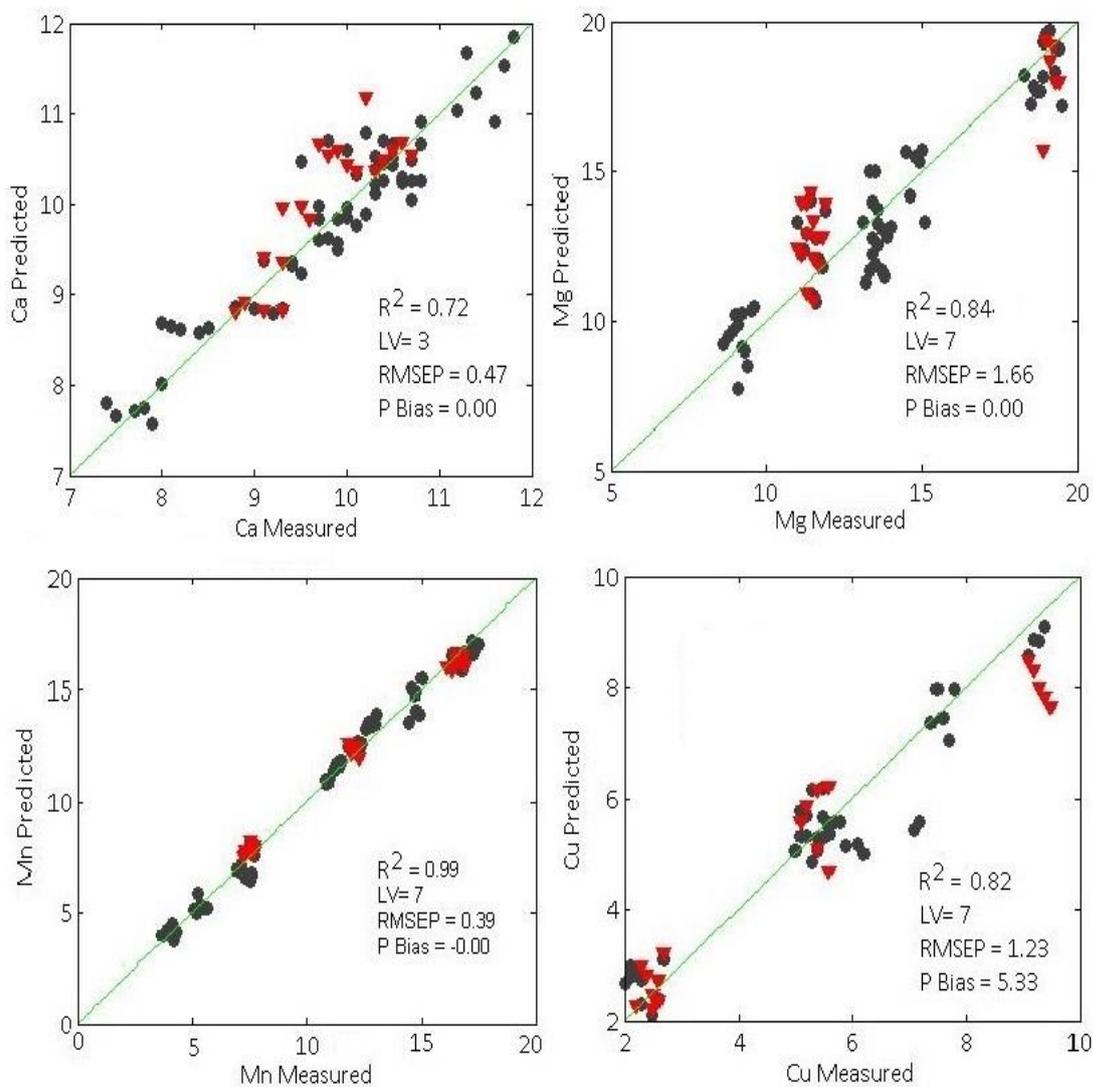


Figura 8. Correlación estadística de las concentraciones de calcio, magnesio, manganeso, cobre y la reflectancia espectral vis-NIR.

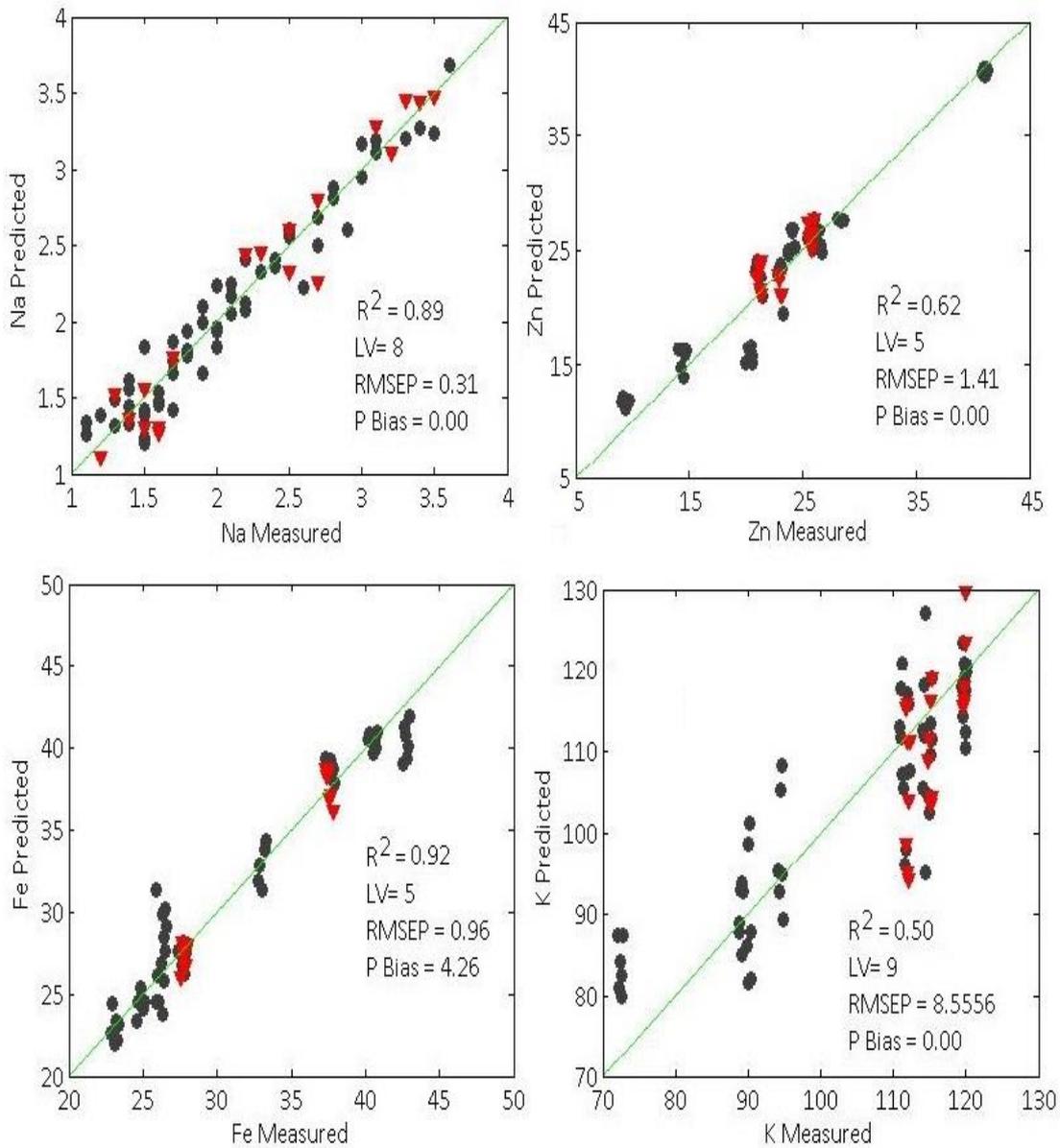


Figura 9. Correlación estadística de las concentraciones de sodio, cinc, hierro, potasio y la reflectancia espectral vis-NIR.

El manganeso, además resultó ser mejor modelo en base al coeficiente RPD determinado. Sin embargo, el potasio y el cinc presentaron valores relativamente bajos en relación al coeficiente de determinación de la calibración 50 y 62% respectivamente.

Las Figuras 10 y 11 muestran los modelos PLS que permitieron comparar la precisión de la predicción vis-NIR de la concentración de minerales en el cultivar 206 de malanga morada.

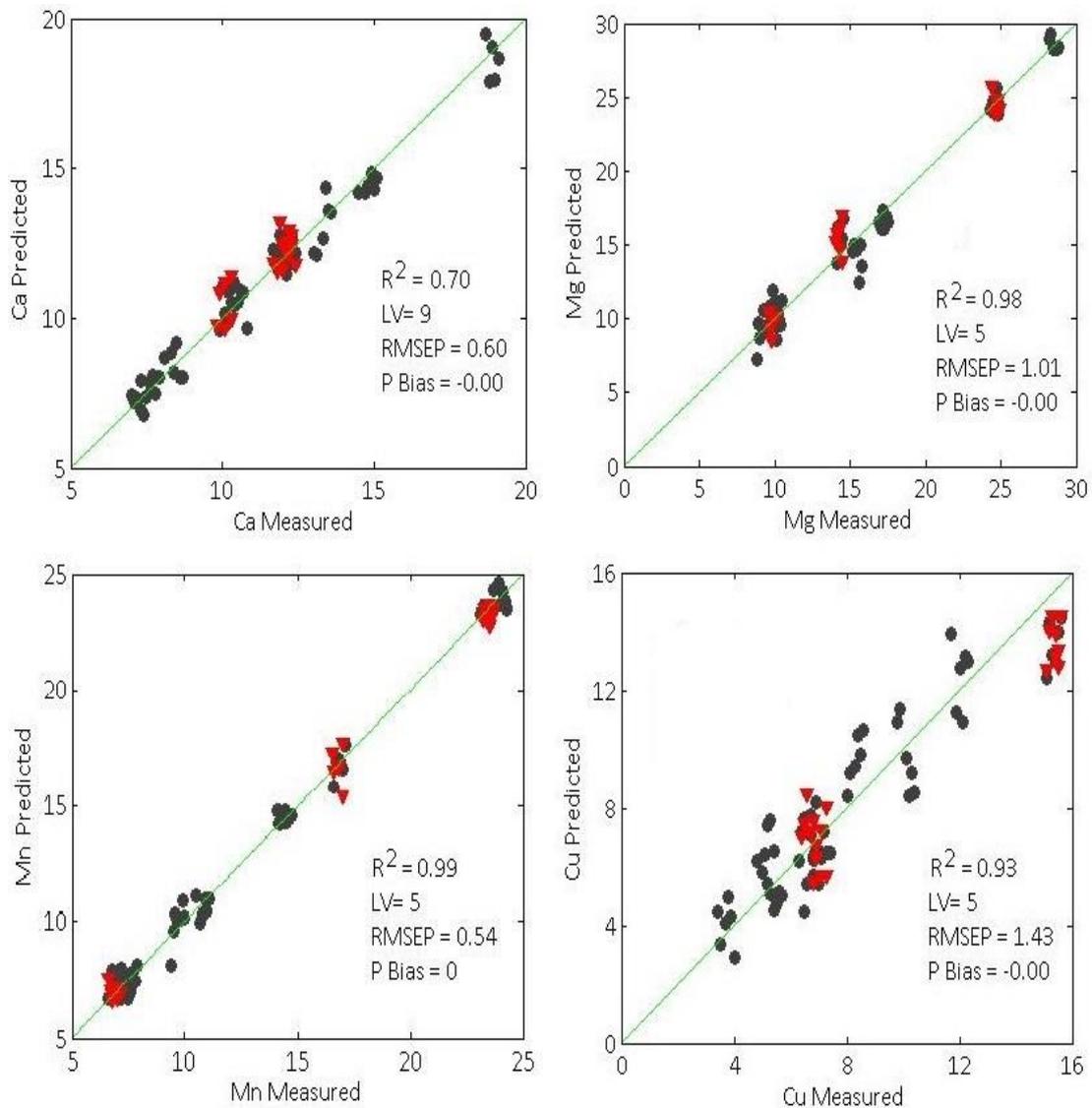


Figura 10. Correlación estadística de las concentraciones de calcio, magnesio, manganeso, cobre y la reflectancia espectral vis-NIR.

Los modelos PLS para la predicción vis-NIR en el cultivar de malanga morada 206 mostraron un coeficiente R^2_{CV} superior a 0.80, excepto en la concentración de calcio que es del 70%, no obstante este valor de correlación es muy bueno para productos agrícolas según lo descrito por (Hiukka, 1998; Hummel *et al.*, 2001; Garrido *et al.*, 2003; Frando, 2009). El manganeso, resultó ser mejor modelo en base al coeficiente RPD determinado

0.99, estos resultados están en correspondencia con los resultados obtenidos en el cultivar 204 de malanga morada.

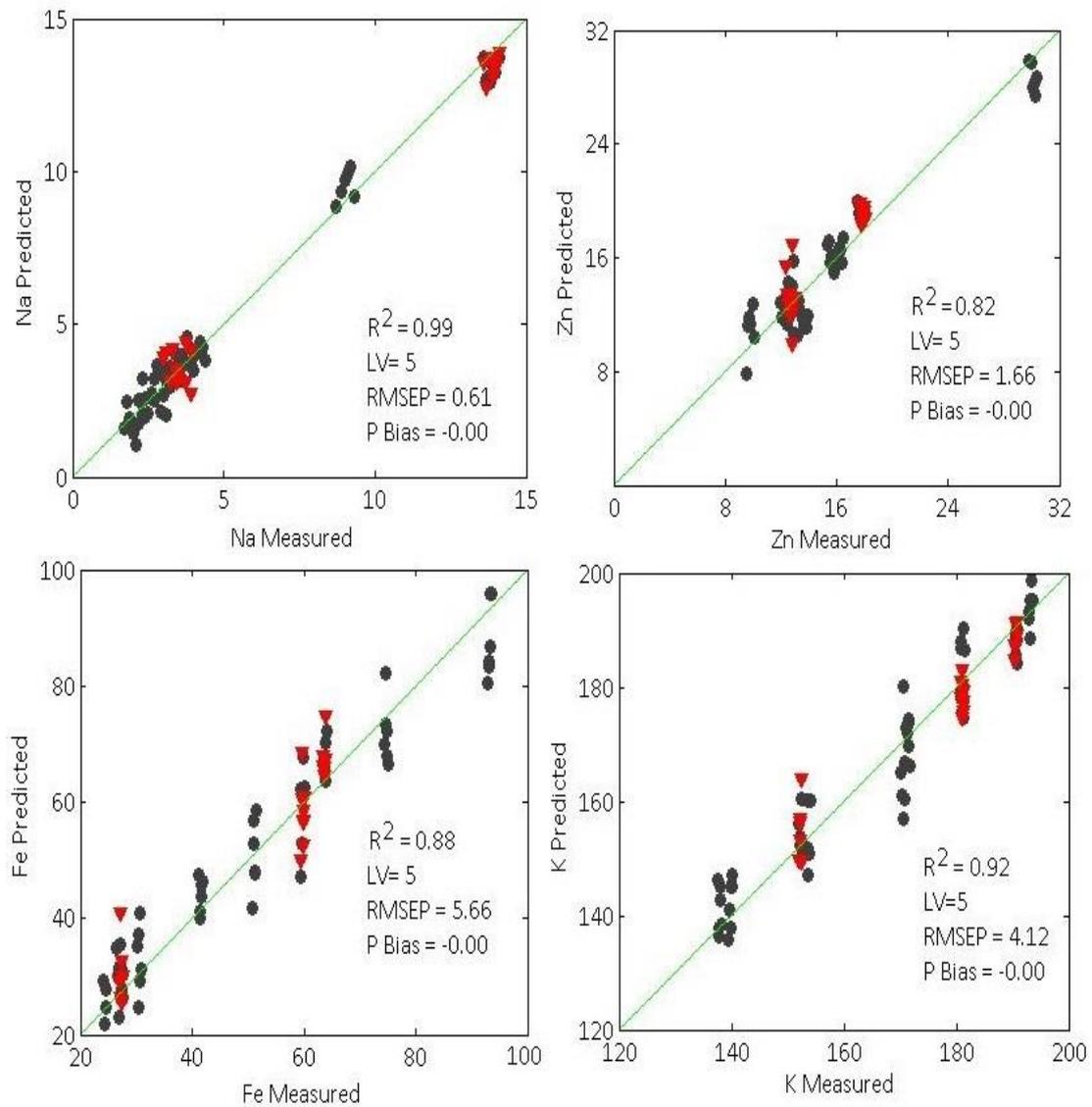


Figura 11. Correlación estadística de las concentraciones de sodio, cinc, hierro, potasio y la reflectancia espectral vis-NIR.

Por el contrario, la predicción en el cultivar 207 de malanga morada mostró un coeficiente R^2 CV superior a 0.90 en todos los minerales analizados, excepto en la concentración de cobre 0.81 como se puede observar en las Figuras 12 y 13.

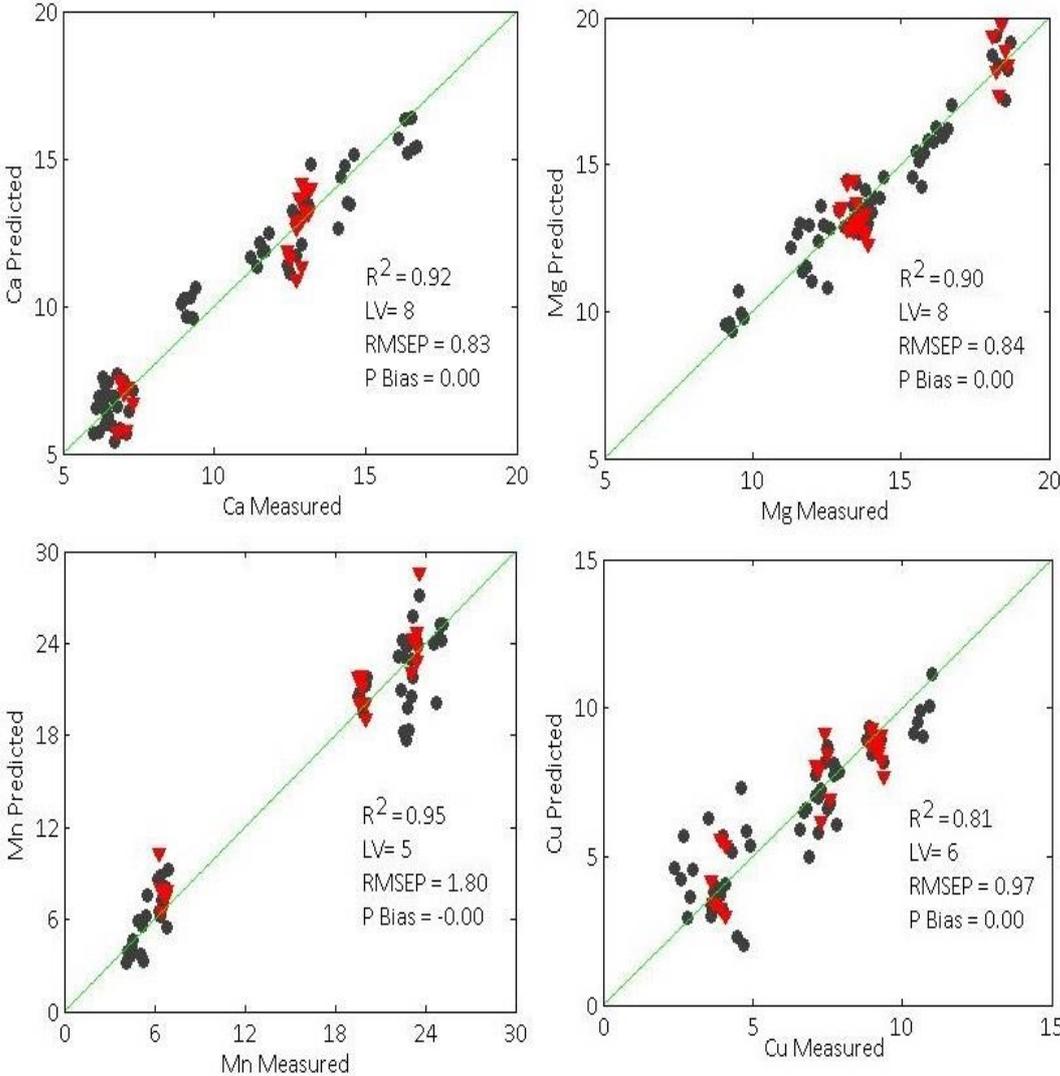


Figura 12. Correlación estadística de las concentraciones de calcio, magnesio, manganeso, cobre y la reflectancia espectral vis-NIR.

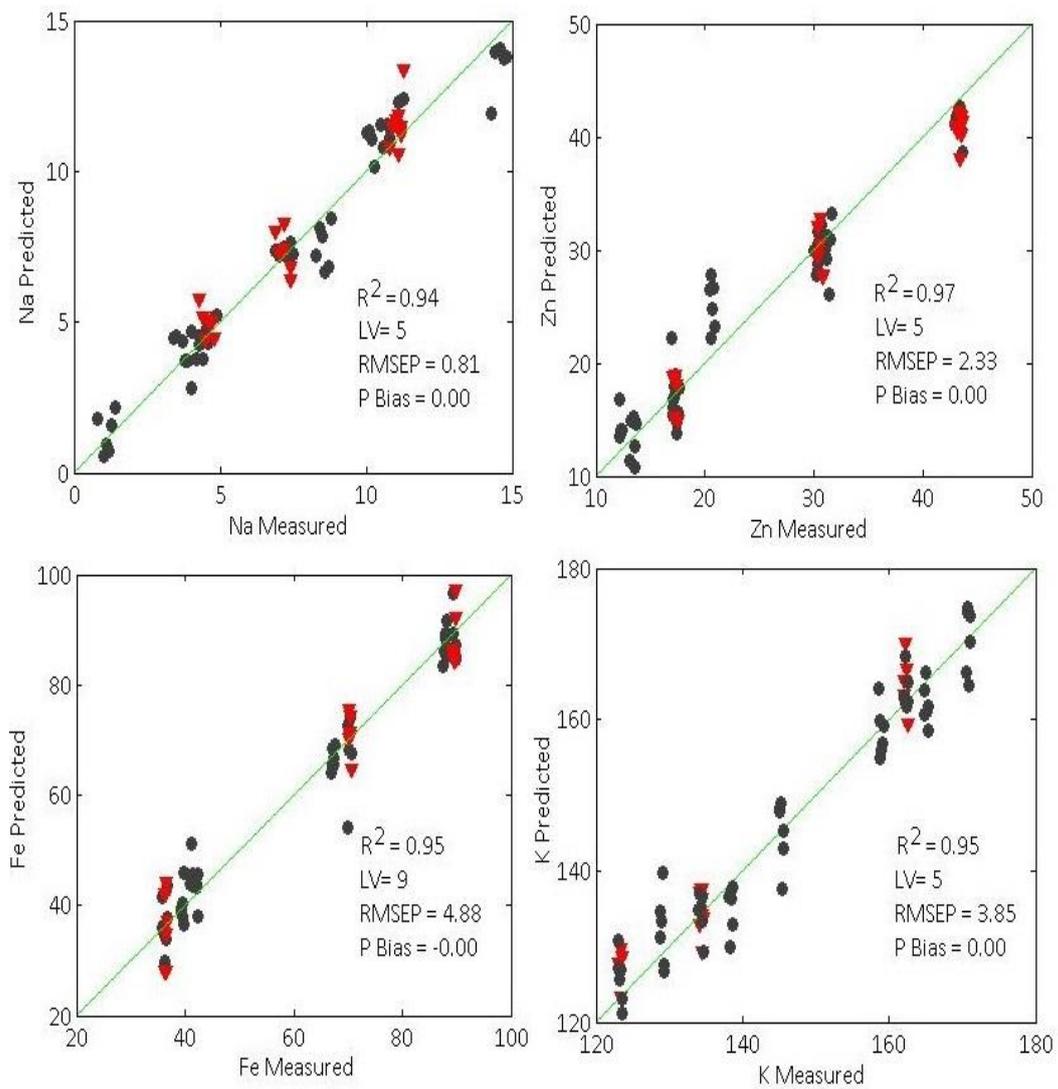


Figura 13. Correlación estadística de las concentraciones de sodio, cinc, hierro, potasio y la reflectancia espectral vis-NIR.

En correspondencia con lo planteado por Wold et al. (2001) cuando se utiliza PLS se asume que el sistema o proceso investigado está influenciado solo por unas pocas variables subyacentes (LV), y que hay parte de X que contiene información que no está relacionada con la matriz Y, que pueden constituir ruido u otros factores. A su vez, (Labbé *et al.*, 2008) considera la propuesta de algunas soluciones para abordar este problema, entre las se encuentran las transformaciones y técnicas de selección de variables, dado que a pesar de todas las ventajas que presenta PLS sobre otros métodos este no tiene un buen desempeño cuando se trabaja con datos no lineales.

Todas las gráficas anteriores muestran que cuando una recta describe adecuadamente la relación entre dos variables, ésta puede utilizarse para predecir valores de “Y” basados en valores de “X”. Si la correlación entre “X” y “Y” fuese 1 ó -1, cada observación se ubicaría en la recta y las predicciones estarían libres de error. Sin embargo, como se mostró, en la gran mayoría de los casos la correlación no es perfecta y por ende siempre tendremos un error asociado a toda predicción (Fallas, 2012). Cuanto mayor sea la intensidad de la asociación entre “X” y “Y”; menor será el error de predicción (Syx) y viceversa.

Conclusiones



Conclusiones

1. En los tres cultivares de malanga morada analizados se observaron diferencias significativas en las concentraciones de sodio, potasio, hierro y cinc, siendo el cultivar 204 el que presentó una menor concentración de minerales.
2. En cada uno de los cultivares evaluados se identificaron las regiones espectrales más influyentes, observándose los mayores valores de reflectancia hacia los 800 nm de la región vis en los tres cultivares de malanga morada.
3. Las correlaciones entre las concentraciones de los minerales y la variabilidad de la reflectancia espectral por medio del método de regresión PLS, mostró muy buenos resultados en los tres cultivares analizados, destacándose el cultivar 207 y el mineral manganeso.

Recomendaciones



Recomendaciones

- 1- Ampliar el rango de análisis de esta investigación para la determinación cuantitativa y no destructiva vis-NIR en otros cultivares de malanga.
- 2- Utilizar la técnica de espectroscopia vis-NIR para determinar los restantes parámetros químicos en malangas y otros tubérculos.

Referencias Bibliográficas



Referencias Bibliográficas

- LÑIGUEZ, G.: *Clasificación mediante técnicas no destructivas y evaluación de las propiedades mecánicas de la madera aserrada de coníferas de gran escuadría para uso estructural*, Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, España, 2007.
- BONETT, J.: *Uso de la espectroscopía de reflectancia difusa (MIR) para la determinación de las propiedades químicas en suelos agrícolas de Colombia*, 92pp., Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia, 2013.
- BORTONI, M. *Importancia de los minerales en el cuerpo [en línea] Disponible en: <http://nosotros2.com/> [Consulta: 25 de mayo 2017].*
- CAMACHO, T.: *Uso de la reflectancia difusa NIR en la determinación de características físicas y químicas de un Oxisol. Carimagua -Meta*, 131pp., Universidad Nacional de Colombia. Facultad de Agronomía. Escuela de Posgrado, Bogotá, Colombia, 2013.
- CARBALLO, M. y L. PRADO: *Bioestadística*, Ed. Ed. Pueblo y educación, Ciudad de La Habana, 1980.
- COBO, J.; G. DERCON; T. YEKEYE; L. CHAPUNGU; C. KADZERE; A. MURWIRA, et al.G. CADISCH: *Integration of mid-infrared spectroscopy and geostatistics in the assessment of soil spatial variability at landscape level.*, 2010.
- COZZOLINO, D.: "Uso de la espectroscopía de reflectancia en el infrarrojo cercano (NIRS) en el análisis de alimentos para animales", *Agrociencia*, 6 (2): 25- 32, 2002.
- CHAMIZO, M.: *Prevención de las pudriciones secas de Xanthosoma sagittifolium (L.) Scott por Sclerotium rolfsii (Sacc) mediante productos de origen natural*, 89pp., Universidad Central Marta Abreu de Las Villas, Santa Clara, Cuba, 2014.
- DÁVILA, A.: *Las pudriciones secas de la malanga (Xanthosoma y Colocasia). Etiología y sintomatología* 54pp., Universidad Central Marta Abreu de Las Villas, Santa Clara, Cuba, 2011.
- DELWICHE, S.; W. MEKWATANAKARN y C. Y. WANG: "Soluble solids and simple sugars measurement in intact mango using near infrared spectroscopy. ", *HortTechnology*,, 2008.
- ESPINOSA, E.: *Estudio de pudriciones secas en el cultivo de la malanga (Xanthosoma spp y Colocacia esculenta (Schott))*, 61pp., Universidad Central Marta Abreu de Las Villas, Santa Clara, Cuba, 2003.
- ESPINOSA, E.; L. HERRERA; A. ESPINOSA; A. DÁVILA; A. BERNAL y J. SIMÓ: "Respuesta de cultivares de malanga (Xanthosoma sagittifolium (L.) Schott) a las pudriciones secas", *SciELO Anylytics*, 44(1): 2017.
- FALLAS, J.: *REGRESIÓN LINEAL SIMPLE y MÚLTIPLE*, 118pp., Universidad Nacional Costa Rica, 2012.
- FAO. *Tabla de Composición de Alimentos de América Latina [en línea] Disponible en: <http://www.tabladealimentos.org> [Consulta].*
- : *Anuario estadístico de la FAO 2014. La Alimentación y la Agricultura en América Latina y el Caribe*, Ed. FAO, Santiago, 2014a.
- . *Producción de malanga a nivel mundial [en línea] Disponible en: www.fao.org/statistics/databases/es [Consulta].*
- FLORES, K. U.: *Determinación no destructiva de parámetros de calidad de frutas y hortalizas mediante espectroscopía de reflectancia en el infarrojo cercano*, 183pp., Universidad de Córdoba, Córdoba, 2009.
- FRANDO: *Técnicas No Destructivas NTD*, 2009.
- GANADERÍA, S. D. A. Y.: *Perfil del mercado de la malanga Xanthosoma sagittifolium (L.) Schott.*, Honduras, 2014.
- GARRIDO, A.; M. D. PÉREZ; J. E. GUERRERO y A. GÓMEZ: Avances en la utilización de la tecnología NIRS. Aplicaciones en producción animal. En, pp. 2003.
- GONZÁLEZ, I. A.: *Caracterización química del color de diferentes variedades de guayaba (Psidium guajava L.) colombiana.*, 84pp., Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C, 2010.

- GONZÁLEZ, I. A.: *Caracterización química del color de diferentes variedades de guayaba (Psidium guajava L.) colombiana*, 84pp., Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, 2012a.
- GONZÁLEZ, M. y L. MONTAÑO: "La espectroscopia y su tecnología: Un repaso histórico y su importancia para el siglo XXI ", *Desarrollo Científico y Tecnológico para la Sociedad*, 9(4): 4602-14, 2015.
- GONZÁLEZ, V.: *Determinación no destructiva de parámetros de calidad en uvas, racimos y mostos mediante espectroscopia de reflectancia en el infrarrojo cercano.*, 194pp., , 194pp., Universidad de Córdoba, Córdoba, 2012b.
- GUZMÁN, F.; P. GARCÍA y I. SALGADO: EVALUACIÓN DE LA Colocasia esculenta (MALANGA BLANCA) COMO AGLUTINANTE EN LA ELABORACIÓN DE UN EMBUTIDO DE PASTA FINA. Ecuador: Servicios Académicos Intercontinentales S.L., pp. 2018.
- HERRERA, B.; D. MARTÍNEZ; G. CASTILLO; P. BARRIENTOS; L. COLINAS; M. PÉREZ y M. AGUILAR: "Concentración nutrimental en hoja, cáscara y pulpa de aguacate CV. 'Fuerte' por efecto de aspersiones foliares de nitrato de calcio", *Agricultura Técnica en México*, 34(3): 2008.
- HIUKKA, R.: "A multivariate approach to the analysis of pine needle samples using NIR", *Elsevier Science Ltd*: pp. 395-401, 1998.
- HUMMEL, J. W.; K. A. SUDDUTH y S. E. HOLLINGER: "Soil moisture and organic matter prediction of surface and subsurface soils using an NIR soil sensor", *Elsevier Science Ltd*: pp. 149-165, 2001.
- KASTENMAYER, P.: "ANÁLISIS DE MINERALES Y ELEMENTOS TRAZA EN ALIMENTOS": 2018.
- LABBÉ, E.; N. ANDRE; M. JEONG y H. CHO: "Enhanced discrimination and calibration of biomass NIR spectral data using non-linear kernel methods. *Bioresource Technology*": 2008.
- LEYVA, L. *Taro o Malanga [en línea] Disponible en: <https://www.tuberculos.org/> [Consulta: 6 de septiembre 2018].*
- LIZAMA, P. y G. BOCCARDO: *Guía de Asociación entre variables (Pearson y Spearman en SPSS)*, Universidad de Chile 2014.
- LÓPEZ, M. E.: *Raíces y tubérculos*, Pueblo y Educación ed, Ciudad de la Habana, Cuba, 1995.
- MALLEY, D. F.: ""Near-infrared spectroscopy as a potential method for routine sediment analysis to improve rapidity and efficiency"", 37(6-7): 181-188, 1998.
- MÁRQUEZ, M.: *Manual de prácticas del espectrofotómetro de absorción atómica GBC 932 AA* 186pp., UNIVERSIDAD VERACRUZANA Orizaba, 2009.
- MARTENS, H. y T. NAES: *Multivariate Calibration*, Chichester, UK., 1989.
- MARTÍNES, E. y M. GONZÁLEZ: *Instructivo técnico del cultivo de la Malanga Género Xanthosoma*, 2007.
- MARTÍNEZ, R.; L. TUYA; M. MARTÍNEZ; A. PÉREZ y A. CÁNOVAS: "EL COEFICIENTE DE CORRELACION DE LOS RANGOS DE SPEARMAN. CARACTERIZACION", *Revista Habanera Ciencias Médicas*, 8(2): 2009.
- MCCLURE, W. F.: "years of near infrared technology: 1800-2003", *J. Near Infrared Spectrosc.* 11, 487-518.: 2003.
- MELGAREJO, J.; J. PROENZA; S. GALÍ y X. LLOVET: "Técnicas de caracterización mineral y su aplicación en exploración y explotación minera", *SciELO Analytics*, 62(1): 2010.
- MILIÁN, M.: "RECURSOS GENÉTICOS DE LA MALANGA DEL GÉNERO Xanthosoma SCHOTT EN CUBA", *Cultivos Tropicales*, 39(2): 126, 2018.
- MILLÁN, F.; S. GRACIA; R. JIMÉNEZ; M. SERRANO; F. ROUSAUD; F. SÁNCHEZ, et al.H. VILLAVICENCIO: "Análisis de las aguas embotelladas y de grifo españolas y de las implicaciones de su consumo en la litiasis urinaria", *SciELO Anylytics*, 33(7): 2009.
- MINAG: *INSTRUCTIVO TECNICO DEL CULTIVO DE LA MALANGA EN CUBA*, La Habana, Cuba, 2018.
- MINITAB: *Interpretar los resultados clave para Correlación*, Minitab 18, 2017.

- NAES, T.; T. ISAKSSON; T. FEARN y T. DAVIES: *Guide to Multivariate Calibration and Classification NIR*, 2002.
- NICASIA, P.; J. C. MACHADO; S. P. FACHINELLO; D. L. GALARCA y M. S. BETEMPS: *Pear quality characteristics by Vis / NIR spectroscopy*, 2011.
- NICOLAI, B. M.; K. BEULLENS; A. BOBELYN y W. PEIRS: "Nondestructive measurement of fruit and vegetable quality by means of NIR spectroscopy: A review. " *Postharvest Biol. Technol.*, 2007.
- PACHECO VARAS, L. H.; L. H. PACHECO VARAS y R. R. PISCULLA ASTUDILLO: *Proyecto de inversión para la exportación del producto agrícola no tradicional malanga hacia el mercado español*, 129pp., Escuela Superior Politécnica del Litoral. Facultad de Economía y Negocios, Guayaquil Ecuador, 2009.
- PALACIOS, C. y M. ÁLVAREZ: *Colegio de Postgraduados. Derechos Reservados. . La Malanga (Colocassia esculenta (L) Shott) bajo un enfoque de Investigación-Desarrollo. BIBLIOTECA BÁSICA DE AGRICULTURA [en línea] Disponible en: www.krow-sc.com [Consulta: 12 de noviembre 2018].*
- PATEIRO, B.: *Coeficiente de variación*, Alicante, España, 2018.
- PEGUERO, A.: *La espectroscopia NIR en la determinación de propiedades físicas y composición química de intermedios de producción y productos acabados*, 272pp., Universidad Autónoma de Barcelona, Barcelona, 2010.
- PEIRS, A.; A. SCHENK y B. M. NICOLAI: ""Effect of natural variability among apples on the accuracy of VIS-NIR calibration models for optimal harvest date predictions.", *Postharvest Biol. Technol.*": 1-13, 2005.
- PÉREZ, C. *Malanga: beneficios y propiedades increíbles [en línea] Disponible en: <https://www.natursan.net/> [Consulta: 1ero de diciembre 2018].*
- PÉREZ, J.; J. SOLER; G. ARANGO; E. MENESES y O. RUIZ: "Espectroscopía NIR como Técnica Exploratoria Rápida para Detección de Amarillamiento en Hojas de Crisantemo (Dendranthema grandiflora var. Zembra)", *Rev.Fac.Nal.Agr.Medellín*, 67(1): 2014.
- QUALITRADEX. *Nutrición [en línea] Disponible en: http://www.qualitradex.com/es/version_espanol.html [Consulta: 2 de octubre 2015].*
- RAMÍREZ, E.; E. PAZ y H. NOGUEIRA: "Caracterización sensorial y análisis de las preferencias de los consumidores de frituras tipo chips de malanga (Colocasia esculenta)", *Revista Venezolana de Ciencia y Tecnología de Alimentos*, 2(2): 292, 2011.
- RESTREPO, L. y J. GONZÁLEZ: "From Pearson to Spearman", *Revista Colombiana de Ciencias Pecuarias*, 2(2): 2007.
- RODRÍGUEZ, W.; P. GARCÍA y A. FAJARDO: "APLICACIONES DE TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS PARA EL ANÁLISIS DE SUELOS", *Facultad de Ciencias Básicas*, 12(2): 251, 2016.
- SANTANA, A.: *SABOR Y SABER. Importancia de los minerales en la alimentación* LISTIN DIARIO, S.A. ed, 2016.
- SARANWONG, S. y S. KAWANO: "Applications to agricultural and marine products: Fruits and vegetables", *In Near-Infrared Spectroscopy in Food Science and Technology*, 2007.
- SARANWONG, S.; J. SORNSRIVICHAI y S. KAWANO: "Prediction of ripe-stage eating quality of mango fruit from its harvest quality measured nondestructively by near-infrared spectroscopy" *Postharvest Biol. Technol.*, 2004.
- SHENK, J. y M. WESTERHAUS: "The application of near infrared reflectance Spectroscopy (NIRS) to forage analysis", 1995.
- SILVA, P. y E. VALVERDE: "Validación de la metodología de cuantificación del magnesio por espectroscopia de absorción atómica de llama en la canasta básica de Costa Rica", *Rev Costarr Salud Pública*, 19 N.º 1: 36-41, 2010.

- VALCÁRCEL, M.: *Optimización del proceso de evaluación y selección de germoplasma de tomate por características de calidad organoléptica: uso de la tecnología NIR y sensores electrónicos.*, Ed. Escuela Superior de Tecnología y Ciencias Experimentales, 2009.
- VELASCO, B.: *EE.UU. es el destino de su malanga*, Revista Líderes, 2017.
- VINUESA, P.: *Tema 8. Correlación: teoría y práctica*, 2016.
- ZAPATA, J. y C. VELÁSQUEZ: *Estudio de la producción y comercialización de la Malanga: estrategias de incentivos para la producción en el país y consumo en la ciudad de Guayaquil*, 158pp., Universidad Politécnica Salesiana, Guayaquil, Ecuador, 2013.
- ZNDT: "Los minerales y su importancia en la alimentación": 2018.
- ZONADIET. *Los minerales y su importancia en la alimentación [en línea] Disponible en: <http://www.zonadiet.com/nutricion/minerales.htm> [Consulta: 18 de enero 2016].*