
ESPECTROSCOPIA Y QUIMIOMETRIA EN AGRICULTURA
**Comparación de modelos quimiométricos para la determinación de sólidos
solubles en remolacha, utilizando un espectroradiómetro hiper-espectral**

PABLO ENRIQUE GUERRERO CASTRO
INGENIERO AGRONOMO

RESUMEN

La NIRS asociada a las fibras ópticas parece ser una tecnología útil para el desarrollo de un sensor óptico capaz de determinar y de predecir directamente, en campo, los grados brix de la remolacha. Para ello, dos configuraciones ópticas basadas en mediciones de reflectancia de la luz fueron analizadas. El campo espectral utilizado comprende la gama NIR entre 650 nm y 1800 nm. Una primera configuración de fibras ópticas simples permitió analizar la influencia del diámetro central de la fibra, mientras que una segunda configuración compuesta de fibras múltiples (Emisión-recepción) permitió evaluar la influencia de la distancia entre las fibras de emisión y de recepción de luz. En paralelo, una esfera de integración de luz, como dispositivo de referencia, ha sido utilizada.

A partir de las lecturas de reflectancia, diferentes métodos quimiométricos han sido aplicados para construir un modelo para cada una de las configuraciones ópticas. En primer lugar, ciertos pretratamientos quimiométricos fueron aplicados, tales como SG1 y SNV. Luego, el método PLS fue utilizado para establecer los modelos de las diferentes configuraciones. Este método permite correlacionar los valores espectrales de reflectancia con los valores brix de referencia medidos con un refractómetro digital. Finalmente, una validación de los modelos propuestos ha sido realizada, utilizando para ello un set de datos independientes.

A través de este análisis, los mejores resultados fueron obtenidos con la configuración compuesta por fibras múltiples. La distancia adecuada entre las fibras para una correcta determinación de sólidos solubles en remolacha fue 0,55 mm. En efecto, la correlación entre los valores brix de laboratorio y los valores espectrales, fue de 0,94 y un error estándar de 1,63 °brix. De esta forma, aunque los modelos podrían ser mejorados, estos resultados muestran que el desarrollo de un sensor óptico en base a fibra óptica, es totalmente posible para la medición de sólidos solubles en remolacha.

Palabras claves:

Remolacha, Fibras Ópticas, NIRS, SSC, PLS, Reflectancia Espectral y Análisis Quimiométrico.

ABSTRACT

The NIRS through optical fibers technology is an option for the development of optical sensors that can be used for a soluble solids prediction in the beet-root sugar samples. Two optical configurations analyzed in the reflectance mode were tested and evaluated in the NIR spectral regions from 650 until 1800 nm. In the first configuration, single fiber-probe, the optical diameter was tested, and the second configuration evaluated was multiple fiber-probes to analyse the distance interaction between the optical fibers, emitting-collecting light. An integration sphere was used for optical reference analysis.

Chemometrical methods were employed in the models development for every optical apparatus. First, the chemometrical pretreatments, like SG1 and SNV were applied on spectral reflectance data. Then, with the PLS method the chemometrical models were constructed. With PLS a correlation, between spectral data and brix values measured in the laboratory with a digital refractometer (Euromex RD 645), was applied. Finally, a models validation was realized with a spectral set independent.

The best results were obtained with multiple fiber-probes and 0.55 mm of distance between the fibers. Indeed, the correlation and standard error of prediction were 0.94 and 1.63° brix, respectively. As well as the models will be ameliorated, these results present an idea of optical sensor development for the SSC analyses on the beet-root sugar is possible.

Keywords:

Beet-Root sugar, Optical fiber, NIRS, SSC, PLS, Spectral Reflectance and Chemometrical Analysis.