



PRINCIPADO DE ASTURIAS

CONSEJERIA DE MEDIO RURAL
Y PESCA

***UTILIZACIÓN DE LA ESPECTROSCOPIA EN EL
INFRARROJO CERCANO PARA EL ANÁLISIS
DE FORRAJES Y MATERIAS PRIMAS***

**SERIE
INFORMES
TÉCNICOS
Nº. 2 / 93**

Instituto de Experimentación
y Promoción Agraria.

**UTILIZACIÓN DE LA ESPECTROSCOPIA EN EL
INFRARROJO CERCANO PARA EL ANÁLISIS
DE FORRAJES Y MATERIAS PRIMAS**

AUTORA:

DE LA ROZA DELGADO, B.

**SERIE
INFORMES
TÉCNICOS
Nº. 2 / 93**

PROGRAMA DE PASTOS Y FORRAJES

INSTITUTO DE EXPERIMENTACIÓN Y PROMOCIÓN AGRARIA

*Edita: Consejería de Medio Rural y Pesca
Instituto de Experimentación y Promoción Agraria*

D.L.: AS-98-1994

UTILIZACION DE LA ESPECTROSCOPIA EN EL INFRARROJO CERCANO PARA EL ANALISIS DE FORRAJES Y MATERIAS PRIMAS.

INTRODUCCION

Los enlaces químicos de las moléculas tienen capacidad para emitir o absorber energía con cambio en el movimiento de sus electrones. La medida de esa emisión o absorción de energía, a una o varias longitudes de onda, puede ser utilizada con fines cualitativos o cuantitativos. En el caso de absorción, el proceso es el siguiente:



La energía es emitida a diversas longitudes de onda, las correspondientes absorbancias constituyen el espectro de absorción de la muestra, que puede ser obtenido de forma gráfica.

Los enlaces químicos no pueden absorber energía de forma continua, sino cantidades discretas. Con esa absorción de energía experimentan movimientos de vibración o de rotación y se dice entonces que se encuentran en estado vibracional o rotacional.

La región espectral comprendida entre 700 y 2500 nm corresponde al infrarrojo cercano (NIR), en la cual las absorciones corresponden a transiciones vibracionales fundamentales.

La posición característica y constante de estas bandas hace que la región NIR sea apropiada para el estudio cuantitativo, cualitativo y estructural de las moléculas orgánicas conteniendo numerosos grupos CH-NH-OH.

La espectroscopia en el infrarrojo cercano (NIRS) fue introducida como una herramienta analítica para productos agrícolas. Estos productos están compuestos de agua, minerales, proteína, carbohidratos, grasas y otros compuestos orgánicos, con complejos enlaces de carbono, hidrógeno y oxígeno fácilmente medibles mediante NIRS.

La cantidad de luz reflejada a las diferentes longitudes de onda por la superficie de la muestra es registrada bajo forma de $\log 1/R$, en la que R es la reflectancia de la muestra a cada longitud de onda, representando una curva comparable a la de absorción, con picos a determinadas λ , correspondientes a bandas de absorción en la muestra. Estas absorciones se pueden correlacionar con constituyentes tales como humedad, proteína, fibra, etc.

INFORMACION

El objetivo fundamental de la técnica NIRS en la alimentación animal es obtener la interrelación entre la composición química de la dieta, los espectros en el infrarrojo cercano y la respuesta animal.

Ante la necesidad de un servicio de análisis de forrajes rápido y eficaz, el laboratorio de Nutrición Animal del IEPA está utilizando la reflectancia en el infrarrojo cercano para conocer el valor nutritivo de los alimentos a la mayor brevedad posible, para lo que dispone de dos equipos NIRS (6250 y 6500).

Estos instrumentos no vienen preparados para utilizar inmediatamente en rutina analítica. Es preciso relacionar alimentos patrón analizados previamente por otros métodos (vía húmeda) con sus espectros, proceso denominado "calibración".

Calibraciones

Un proceso de calibración es la creación de un modelo matemático que relaciona la respuesta del instrumento con la composición química o "calidad" de la muestra medida.

Dada la sofisticación de los equipos instrumentales se generan miles de medidas individuales a distintas longitudes de onda. Por consiguiente es necesario el apoyo de potentes paquetes estadísticos para procesar los datos, y puesto que se trata de una tecnología muy reciente aparecen de continuo nuevas posibilidades.

Algoritmos para calibración

• MLR - Regresión lineal múltiple.

-El número de muestras de calibración ha de ser mayor o igual al número de longitudes de ondas seleccionadas.

-Presenta problemas de colinearidad.

• PCR - Regresión por componentes principales.

-Condensa la información espectral a unos pocos factores.

-El número de muestras de calibración ha de ser mayor o igual al número de factores.

-Solventa los problemas de colinearidad.

-Los factores son calculados sin considerar la propiedad a predecir.

-Presenta problemas de selección de factores.

• PLS - Regresión por mínimos cuadrados.

-Condensa la información espectral a unos pocos factores.

-Los factores son calculados en función de las medidas de la propiedad a predecir.

-Solventa los problemas de colinearidad.

-Presenta problemas de selección del número óptimo de factores.

Etapas necesarias para efectuar análisis por NIR

- 1.- Selección de algoritmo de calibración.
- 2.- Procesado de espectros.
- 3.- Selección de regiones espectrales y muestras.
- 4.- Selección de número de factores PCR/PLS.
- 5.- Selección de muestras de validación.
- 6.- Selección de un modelo de mantenimiento de la ecuación.

Paquetes estadísticos

a) Neural networks

El Danish Meat Research Institute (DMRI) ha desarrollado un método de calibración que combina el PCA/PLS con "neural networks".

PCA y PLS reducen el número de datos de una calibración antes de ejecutar la regresión final y el "neural networks" puede modelar las características no lineales en un conjunto de datos sin asumir a priori la causa de la no linealidad.

b) Unscrambler

Ha sido desarrollado en Noruega para el desarrollo de calibraciones multivariantes y predicción. Presenta las siguientes características:

- Clasificación por PCA (Análisis de componentes principales).
- PCR, PLS.
- Neural Net.
- Diseños experimentales.
- Procesado de datos.
- Gráficos para resultados (histogramas, curvas, etc.).
- Tratamiento de texto.

c) ISI

Desarrollado en la Universidad de Pensilvania, permite la utilización de MLR, PCR y PLS, pero es el único paquete estadístico que tiene capacidad para transferir calibraciones de un instrumento a otro con errores mínimos de ejecución.



PRINCIPADO DE ASTURIAS

CONSEJERIA DE MEDIO RURAL
Y PESCA

Instituto de Experimentación y Promoción Agraria

Programa de Difusión y Transferencia de Tecnología Agraria

Aptdo. 13 – 33300 Villaviciosa – Asturias (España)

Telf. 985890066 – Fax: 985891854

Email: seridavilla@serida.org