

**UNIVERSIDAD NACIONAL AGRARIA LA
MOLINA**

FACULTAD DE INDUSTRIAS ALIMENTARIAS



**DETERMINACIÓN DE LA CORRELACIÓN ENTRE EL
ANÁLISIS QUÍMICO PROXIMAL Y EL ANÁLISIS POR
ESPECTROSCOPIA DE TRANSMITANCIA EN EL INFRARROJO
CERCANO (NIRS) EN SEMILLAS DE KIWICHA
(*Amaranthus caudatus L.*)**

Tesis para optar el título de:

INGENIERO EN INDUSTRIAS ALIMENTARIAS

ERNESTO BENDEZÚ AGUILAR

Lima - Perú.

2011

ÍNDICE GENERAL

	Pág.
RESUMEN	
I. INTRODUCCIÓN.....	1
II. REVISIÓN DE LITERATURA.....	3
2.1. LA KIWICHA.....	3
2.1.1. Nombre científico.....	3
2.1.2. Origen.....	3
2.1.3. Morfología.....	4
2.1.4. Cosecha.....	5
2.1.5. Post cosecha.....	5
2.1.6. Composición química.....	6
2.1.7. Importancia económica y distribución geográfica.....	6
2.2. ANALISIS FÍSICOS – QUÍMICOS.....	7
2.2.1. Contenido de proteína cruda.....	7
2.2.2. Contenido de humedad.....	7
2.2.3. Contenido de grasa bruta.....	8
2.2.4. Contenido de ceniza.....	8
2.2.5. Contenido de fibra bruta.....	9
2.3. INSTRUMENTACIÓN.....	9
2.4. ESPECTRO ELECTROMAGNÉTICO.....	9
2.5. ESPECTROSCOPIA INFRARROJA.....	14

2.6. CORRELACIÓN DE LOS ESPECTROS DEL INFRARROJO CON LA ESTRUCTURA MOLECULAR.....	17
2.7. REGIÓN DEL INFRARROJO CERCANO.....	22
2.7.1. Bases físicas.....	24
2.7.2. Aplicación de la espectrometría en infrarrojo cercano.....	27
2.7.3. Espectrofotómetro IR.....	29
2.7.4. Ley de Lambert – Beer.....	31
2.7.5. Análisis quimiométrico de los datos espectroscópicos.....	33
2.7.5.1 Análisis de componentes principales.....	34
2.7.5.2 Métodos de regresión para la calibración.....	36
2.7.6. Desarrollo de la calibración.....	39
2.7.7. Campo de aplicación de la tecnología NIRS.....	41
2.7.8. Validación de la ecuación.....	43
2.7.8.1 Validación interna.....	43
2.7.8.2 Validación externa.....	44
2.7.9. Desventajas de la tecnología NIRS.....	45
III. MATERIALES Y MÉTODOS.....	46
3.1. LUGAR DE EJECUCIÓN.....	46
3.2 MATERIA PRIMA.....	46
3.3. MATERIALES.....	46
3.4. EQUIPOS.....	47
3.5. REACTIVOS.....	48
3.6. MÉTODOS DE ANÁLISIS.....	49
3.6.1. Análisis físicos – químicos.....	49
3.6.1.1. Determinación del porcentaje de proteínas.....	49
3.6.1.2. Determinación de la humedad.....	49

3.6.1.3. Determinación de ceniza.....	49
3.6.1.4. Determinación de fibra.....	49
3.6.1.5. Determinación de grasa.....	50
3.6.2. Análisis espectroscópico.....	50
3.7. METODOLOGÍA EXPERIMENTAL.....	53
3.7.1. Muestreo de unidades experimentales.....	54
3.7.2. Escaneo de las muestras.....	54
3.7.3. Determinación del análisis proximal.....	55
3.7.4. Desarrollo del modelo de aplicación.....	55
3.7.5. Validación del modelo de aplicación.....	57
3.7.6. Transferencia del modelo al equipo y análisis de rutina.....	57
3.8. ANALISIS ESTADÍSTICO.....	58
3.8.1. Análisis de regresión mediante mínimos cuadrados parciales Modificados (MPLS).....	58
3.8.1.1 Error de la regresión.....	59
3.8.1.2 Error típico de predicción y/o validación.....	59
3.8.1.3 Residual.....	60
3.8.1.4 Bias o Sesgo.....	60
3.8.1.5 Coeficiente de determinación de la regresión.....	60
3.8.1.6 Desviación típica.....	60
3.8.1.7 Coeficiente de variación.....	60
3.8.1.8 RPD.....	61
3.8.1.9 RER.....	61
3.8.1.10 Error del método de referencia.....	62
3.8.2 Prueba de linealidad de los resultados.....	62
IV. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	65
V. CONCLUSIONES.....	101
VII. RECOMENDACIONES.....	103
VIII. BIBLIOGRAFÍA.....	104
IX. ANEXO.....	11

ÍNDICE DE CUADROS

N° de cuadro	Título	Pág.
1	Composición química de la kiwicha por 100g.....	6
2	Componentes de espectros de infrarrojo.....	16
3	Bandas de absorción NIR de los principales componentes orgánicos de los alimentos y los enlaces que los representan.....	26
4	Factores que causan outliers (anómalos).....	36
5	Valores de los estadísticos de RPD y RER relacionados con el control NIRS de productos y procesos.....	37
6	Criterios de interpretación de los valores del coeficiente de variación en relación con el control NIRS de productos y procesos.....	38
7	Características e información técnica del Infratec 1241.....	51
8	Porcentajes de variación de la población para la calibración para cada constituyente.....	72
9	Estadísticos de calibración para las ecuaciones obtenidas para la determinación de análisis proximal de kiwicha	74
10	Evaluación de las ecuaciones con relación a su precisión y exactitud.	76
11	Estadísticos estimadores de la calidad de la calibración.....	77
12	Estadísticos matemáticos del proceso de validación externa de ecuaciones para los cinco parámetros.....	79

ÍNDICE DE FIGURAS.

Nº de figura	Título	Pág.
1	Diagrama del espectro electromagnético.....	11
2	Vibración de estiramiento de una molécula.....	17
3	Vibración de deformación de una molécula.....	18
4	Vibración de estiramiento de una molécula biatómica.....	18
5	Distintos modos de vibración en una molécula de más de dos átomos.	20
6	Estado de alta energía (excitado) en una molécula.....	21
7	Plano de simetría de una molécula.....	22
8	Interacción de la luz con la materia.....	25
9	Esquema simplificado de las partes principales de un espectrofotómetro IR.....	29
10	Haz de radiación que atraviesa un cuerpo.....	31
11	Analizador de granos INFRATEC 1241.....	50
12	Flujo general de los pasos a seguir en la metodología experimental.	52
13	Histograma y polígono de frecuencias del porcentaje de proteínas	66
14	Histograma y polígono de frecuencias del porcentaje de humedad	67
15	Histograma y polígono de frecuencias del porcentaje de grasa	68
16	Histograma y polígono de frecuencias del porcentaje de fibra	69
17	Histograma y polígono de frecuencias del porcentaje de ceniza	70
18	Relación entre los datos de referencia (químico) y los datos NIRS de calibración de proteína obtenidos por el programa MINITAB.....	83
19	Relación entre los datos de referencia (químico) y los datos NIRS de validación de proteína arrojados por el programa MINITAB.....	85
20	Relación entre los datos de referencia (químico) y los datos NIR de calibración de humedad arrojados por el programa MINITAB.....	86
21	Relación entre los datos de referencia (químico) y los datos NIRS de validación de humedad arrojados por el programa MINITAB.	88
22	Relación entre los datos de referencia (químico) y los datos NIRS de calibración de grasa arrojados por el programa MINITAB.....	90

23	Relación entre los datos de referencia (químico) y los datos NIRS de validación de grasa arrojados por el programa MINITAB.....	92
24	Relación entre los datos de referencia (químico) y los datos NIRS de calibración de fibra arrojados por el programa MINITAB.....	94
25	Relación entre los datos de referencia (químico) y los datos NIRS de validación de fibra arrojados por el programa MINITAB.....	96
26	Relación entre los datos de referencia (químico) y los datos NIRS de calibración de ceniza arrojados por el programa MINITAB.....	98
27	Relación entre los datos de referencia (químico) y los datos NIRS de validación de grasa arrojados por el programa MINITAB.....	100

ÍNDICE DE ANEXOS.

Nº de anexo	Título	Pág.
1	Requerimiento de cultivo de la kiwicha.....	111
2	Características de las accesiones en función al color de panoja, tallo y grano.....	112
3	Resultados de análisis proximal	115
4	Resultados de calibración de muestras para estimación de proteína por NIRS.....	117
5	Resultados de validación de muestras para estimación de proteína por NIRS.....	119
6	Resultados de calibración de muestras para estimación de humedad por NIRS.....	120
7	Resultados de validación de muestras para estimación de humedad por NIRS.....	122
8	Resultados de calibración de muestras para estimación de grasa por NIRS.....	123
9	Resultados de validación de muestras para estimación de grasa por NIRS.....	125
10	Resultados de calibración de muestras para estimación de fibra por NIRS.....	126
11	Resultados de validación de muestras para estimación de fibra por NIRS.....	128
12	Resultados de calibración de muestras para estimación de ceniza por NIRS.....	129
13	Resultados de validación de muestras para estimación de ceniza por NIRS.....	131
14	Prueba de coeficientes del modelo para calibración de proteína....	132
15	Prueba de coeficientes del modelo para validación de proteína.....	133

16	Prueba de coeficientes del modelo para calibración de humedad....	134
17	Prueba de coeficientes del modelo para validación de humedad....	135
18	Prueba de coeficientes del modelo para calibración de grasa.....	136
19	Prueba de coeficientes del modelo para validación de grasa.....	137
20	Prueba de coeficientes del modelo para calibración de fibra.....	138
21	Prueba de coeficientes del modelo para validación de fibra.....	139
22	Prueba de coeficientes del modelo para calibración de ceniza.....	140
23	Prueba de coeficientes del modelo para validación de ceniza.....	141
24	Prueba de Intervalos de confianza para coeficientes de proteína al 95%.....	142
25	Prueba de Intervalos de confianza para coeficientes de Humedad al 95%.....	143
26	Prueba de Intervalos de confianza para coeficientes de Grasa al 95%.	144
27	Prueba de Intervalos de confianza para coeficientes de Fibra al 95%.	144
28	Prueba de Intervalos de confianza para coeficientes de Ceniza al 95%.	145
29	Prueba de normalidad de los residuales de proteína en calibración.	145
30	Prueba de normalidad de los residuales de proteína en validación.	146
31	Prueba de normalidad de los residuales de humedad en calibración.	147
32	Prueba de normalidad de los residuales de humedad en validación.	148
33	Prueba de normalidad de los residuales de grasa en calibración.	149
34	Prueba de normalidad de los residuales de grasa en validación.	150
35	Prueba de normalidad de los residuales de fibra en calibración.	151
36	Prueba de normalidad de los residuales de fibra en validación.	152
37	Prueba de normalidad de los residuales de ceniza en calibración.	153
38	Prueba de normalidad de los residuales de ceniza en validación.	154
39	Homogeneidad de varianzas para datos de proteína en calibración.	155
40	Homogeneidad de varianzas para datos de proteína en validación.	156
41	Homogeneidad de varianzas para datos de humedad en calibración.	157
42	Homogeneidad de varianzas para datos de humedad en validación.	158
43	Homogeneidad de varianzas para datos de grasa en calibración.	159
44	Homogeneidad de varianzas para datos de grasa en validación.	160
45	Homogeneidad de varianzas para datos de fibra en calibración.	161
46	Homogeneidad de varianzas para datos de fibra en validación.	162

47	Homogeneidad de varianzas para datos de ceniza en calibración.	163
48	Homogeneidad de varianzas para datos de ceniza en validación.	164