



UNIVERSIDAD DE SALAMANCA

ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR DE ZAMORA

Departamento de Construcción y Agronomía

TESIS DOCTORAL

**REDES NEURONALES ARTIFICIALES
APLICADAS A LA PREDICCIÓN DE PARÁMETROS
EN ALIMENTOS ACOGIDOS A MARCAS DE CALIDAD**

MEMORIA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR

PRESENTADA POR

Pedro A. Hernández Ramos

Bajo la dirección de las doctoras

Isabel Revilla Martín y Ana María Vivar Quintana

Zamora, 2021

Dedicado a mis tres familias,
a mis profesores y maestros,
a mis amigos, a mis compañeros
y a todos aquellos para quienes aprender,
enseñar y ser mejores cada día...
es satisfacción de toda su vida.

“Hay una fuerza motriz más poderosa que el vapor, la electricidad y la energía atómica:

LA VOLUNTAD”

(Albert Einstein)

Índice

I.	ARTÍCULOS INCLUIDOS EN ESTA TESIS	1
II.	AUTORIZACIÓN DIRECTORAS DE TESIS.....	5
III.	INFORME DE LA COMISIÓN ACADÉMICA DEL PROGRAMA DE DOCTORADO DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA QUÍMICAS	9
IV.	HIPÓTESIS DE PARTIDA Y OBJETIVOS	13
V.	INTRODUCCIÓN.....	19

CAPÍTULO I

1.	Marcas de Calidad Alimentaria	21
1.1.	Concepto de calidad alimentaria	21
1.2.	Sellos de Calidad en la Unión Europea	22
1.2.1.	Denominación de Origen Protegida.....	24
1.2.2.	Indicación Geográfica Protegida.....	24
1.2.3.	Especialidad Tradicional Garantizada.....	25
1.3.	Productos alimenticios acogidos a sellos de calidad en la Unión Europea.....	27
1.4.	Productos alimenticios de España acogidos a sellos de calidad en la Unión Europea.....	31
1.4.1.	Sellos de calidad para productos cárnicos en España.....	32
1.4.2.	Sellos de calidad para quesos en España	33
1.5.	Legislación y otras marcas de calidad alimentaria en España	36
1.6.	Consumo alimentario en España	37

CAPÍTULO II

2.	Redes Neuronales Artificiales	39
2.1.	Introducción.....	39
2.2.	Red Neuronal Biológica vs Red Neuronal Artificial.....	40
2.3.	Conceptos básicos de Redes Neuronales Artificiales	41
2.3.1.	La neurona artificial	43
2.3.2.	Funciones de transferencia	46
2.4.	Clasificación de las Redes Neuronales Artificiales.....	50
2.4.1.	Clasificación según la naturaleza de los datos de entrada y de salida.....	50
2.4.2.	Clasificación según el tipo, grado o patrón de conectividad.	50
2.4.3.	Clasificación según la topología de la red.	51
2.4.4.	Clasificación según el tipo de asociación entre datos de entrada y de salida.	52
2.4.5.	Clasificación según la dinámica de actualización del estado de las neuronas	53
2.4.6.	Clasificación según el algoritmo de aprendizaje o entrenamiento utilizado.....	53
2.5.	La red neuronal Perceptron Multicapa (MLP)	58
2.5.1.	El algoritmo Backpropagation (BP).....	59
2.5.1.1.	Razón de aprendizaje y momento	66
2.5.1.2.	Deficiencias del algoritmo	68
2.5.2.	Algoritmos del Gradiente Conjugado Escalado y de Levenberg-Marquardt.	70
2.5.2.1.	Algoritmo del Gradiente Conjugado Escalado.....	71
2.5.2.2.	Algoritmo de Levenberg-Marquardt.	73
2.6.	Capacidad de generalización de las Redes Neuronales Artificiales	74
2.7.	Métricas de bonanza.....	76
2.7.1.	Matrices de confusión	76
2.7.2.	Curvas ROC.....	82
2.8.	Entrenamiento con Matlab.....	84
2.9.	Ventajas e inconvenientes de las Redes Neuronales Artificiales	87
2.10.	Aplicación de las Redes Neuronales Artificiales en alimentos.....	89

CAPÍTULO III

3. Espectroscopía de Infrarrojo Cercano	97
3.1. Fundamentos	97
3.2. Espectroscopía de reflectancia	99
3.3. Interpretación de los espectros en la región NIR	101
3.4. El instrumento	107
3.5. Estandarización del equipo	110
3.6. Quimiometría	111
3.6.1. Pretratamientos espectrales.....	112
3.6.2. Análisis de Componentes Principales	116
3.6.3. Regresión por Mínimos Cuadrados Parciales Modificados.....	118
3.6.4. Análisis cualitativo. Discriminación por RMS-X	122
3.7. Ventajas e inconvenientes de la espectroscopía NIR	123
3.8. Aplicaciones de la tecnología NIRS en alimentos	124
VI. COMPENDIO DE ARTÍCULOS	137
Artículo 1. Prediction of Sensory Parameters of Cured Ham: A Study of the Viability of the Use of NIR Spectroscopy and Artificial Neural Networks	139
Artículo 2. Comparison of artificial neural networks and multiple regression tools applied to near infrared spectroscopy for predicting sensory properties of products from quality labels.....	165
Artículo 3. Estimation of somatic cell count levels of hard cheeses using physicochemical composition and artificial neural networks	185
VII. CONCLUSIONES.....	203
VIII. BIBLIOGRAFÍA.....	207

Índice de imágenes

Imagen 1.1: Sellos de la Unión Europea para productos acogidos a DOP, IGP y ETG.....	22
Imagen 1.2: Distribución de registros en eAmbrosia por categoría y por pertenencia a la UE	29
Imagen 1.3: Distribución de sellos por clase de alimento de los productos españoles en eAmbrosia	31
Imagen 1.4: Distribución de sellos de productos cárnicos por países en eAmbrosia.....	32
Imagen 1.5: Distribución de sellos de Quesos por países en eAmbrosia	34
Imagen 1.6: Evolución del consumo alimentario en España	37
Imagen 1.7: Distribución de la alimentación en España	38
Imagen 1.8: Distribución por comunidad del consumo alimentario en España.....	38
Imagen 2.1: Estructura jerárquica de un Sistema Neuronal Artificial.....	42
Imagen 2.2: Modelo neuronal de McCulloch-Pitts ampliado.....	44
Imagen 2.3: Modelo neuronal simplificado.....	46
Imagen 2.4: Funciones de transferencia	48
Imagen 2.5: Tipos de ANN.....	51
Imagen 2.6: ANN de tipo Multi Layer Feedforward	52
Imagen 2.7: Proceso de entrenamiento supervisado de una ANN	55
Imagen 2.8: Proceso de entrenamiento no supervisado de una ANN	56
Imagen 2.9: Nomenclatura del Algoritmo BP	59
Imagen 2.10: Representación de la superficie de error para dos parámetros.....	66
Imagen 2.11: Representación de la capacidad de generalización de una red	74
Imagen 2.12: Representación del inicio de sobreentrenamiento de una red.....	75
Imagen 2.13: Matriz de confusión para tres variables.....	77
Imagen 2.14: Matriz de confusión de ejemplo para tres variables.....	78
Imagen 2.15: Representación de los conceptos de exactitud y precisión	80
Imagen 2.16: Curva ROC y elementos significativos	83
Imagen 3.1: Espectro electromagnético	98
Imagen 3.2: Fenómenos de Absorción, Transmisión y Reflexión	98
Imagen 3.3: Representación del fenómeno de reflectancia difusa	100
Imagen 3.4: Cuantificación energética.....	102
Imagen 3.5: Curvas de energía potencial de osciladores armónico y anarmónico.....	104
Imagen 3.6: Espectro NIR	105
Imagen 3.7: Bandas de grupos funcionales en la región NIR.....	106
Imagen 3.8: Equipo NIRS con sonda de fibra óptica acoplada	107
Imagen 3.9: Sonda de fibra óptica acoplada al equipo NIRS	109

Índice de imágenes

(Continuación)

Imagen 3.10: Máximas absorbancias para el poliestireno de referencia	110
Imagen 3.11: Espectro de ruido. Instrucciones WinISI.....	111
Imagen 3.12: Espectro con 2 bandas solapadas y resolución con la 2ª derivada	114
Imagen 3.13: Espectros y combinación de tratamientos sobre los espectros	115
Imagen 3.14: Representación gráfica de la reducción de la dimensionalidad por medio de PCA. 116	
Imagen 3.15: Análisis de Componentes Principales	117

Índice de tablas

Tabla 1.1: Distribución de sellos por país	30
Tabla 1.2: Distribución de sellos para los productos cárnicos (clase 1.2)	32
Tabla 1.3: Productos cárnicos españoles (clase 1.2) acogidos a Marcas de Calidad	33
Tabla 1.4: Distribución de sellos para los quesos (clase 1.3)	33
Tabla 1.5: Productos españoles (clase 1.3) en eAmbrosia.....	35
Tabla 1.6: Productos españoles (clases 1.2 y 1.3) acogidos a Marcas de Garantía (CyL)	36
Tabla 3.1: Características de absorción NIR del agua.....	106

Siglas y Acrónimos

	Inglés		Español
<i>AI</i>	Artificial Intelligence	<i>IA</i>	Inteligencia Artificial
<i>ANN</i>	Artificial Neural Network	<i>RNA</i>	Red Neuronal Artificial
<i>BNN</i>	Biological Neural Network	<i>RNB</i>	Red Neuronal Biológica
<i>BP</i>	Backpropagation		Retropropagación
<i>DT</i>	DeTrend		Corrección de la Tendencia DeTrend
<i>EU</i>	European Union	<i>UE</i>	Unión Europea
<i>FIR</i>	Far Infrared		Infrarrojo Lejano
<i>GC/MS</i>	Gas Chromatography coupled to Mass Spectrometry		Cromatografía de Gases acoplada a Espectrometría de Masas
<i>HSI</i>	Hyperspectral Imaging		Imágenes Hiperespectrales
<i>IR</i>	Infrared		Infrarrojo
<i>k-NN</i> o <i>KNN</i>	K Nearest Neighbours		K vecinos más cercanos
<i>LDA</i>	Linear Discriminant Analysis		Análisis Discriminante Lineal
<i>LM</i>	Levenberg-Marquardt		
<i>MIR</i>	Medium Infrared		Infrarrojo Medio
<i>MLP</i>	Multi Layer Perceptron		Perceptron Multicapa
<i>MLR</i>	Multiple Linear Regression		Regresión Lineal Múltiple
<i>MPLS</i> o <i>MPLSR</i>	Modified Partial Least Squares		Regresión por Mínimos Cuadrados Parciales Modificados
<i>MSC</i>	Multiplicative Scatter Correction		Corrección del efecto Multiplicativo de la Dispersión
<i>MSI</i>	Multispectral Imaging		Imágenes Multiespectrales
<i>MUFA</i>	MonoUnsaturated Fatty Acids	<i>AGMI</i>	Ácidos Grasos Monoinsaturados
<i>NIR</i>	Near Infrared		Infrarrojo Cercano
<i>NIRS</i>	Near InfraRed Spectroscopy		Espectroscopía de Infrarrojo Cercano
<i>PAT</i>	Process Analytical Technique		Técnica Analítica de Procesos

Inglés		Español	
<i>PC</i>	Principal Components		Componentes Principales
<i>PCA</i>	Principal Components Analysis		Análisis de Componentes Principales
<i>PCR</i>	Principal Component Regression		Regresión por Componentes Principales
<i>PDO</i>	Protected Designation of Origin	<i>DOP</i>	Denominación de Origen Protegida
<i>PGI</i>	Protected Geographical Indication	<i>IGP</i>	Indicación Geográfica Protegida
<i>PLS o PLSR</i>	Partial Least Squares Regression		Regresión por Mínimos Cuadrados Parciales
<i>PLS-DA</i>	Partial Least Squares Discriminant Analysis		Análisis Discriminante por Mínimos Cuadrados Parciales
<i>PUFA</i>	PolyUnsaturated Fatty Acids	<i>AGP</i>	Ácidos Grasos Poliinsaturados
<i>QDA</i>	Quantitative Descriptive Analysis		Análisis Descriptivo Cuantitativo
<i>ReLU</i>	REctified Linear Unit		Unidad Lineal Rectificada
<i>RMSE</i>	Root Mean Square Error		Raíz cuadrada del Error Cuadrático Medio
<i>ROC</i>	Receiver Operating Characteristic		Característica Operativa del Receptor
<i>SCC</i>	Somatic Cell Count	<i>RCS</i>	Recuento de Células Somáticas
<i>SEC</i>	Standard Error of Calibration		Error Estándar de Calibración
<i>SECV</i>	Standard Error Cross Validation		Error Estándar de Validación Cruzada
<i>SEP</i>	Standard Error of Prediction		Error Estándar de Predicción
<i>SFA</i>	Saturated Fatty Acids	<i>AGS</i>	Ácidos Grasos Saturados
<i>SGC</i>	Scaled Conjugate Gradient	<i>GCS</i>	Gradiente Conjugado Escalado
<i>SIMCA</i>	Soft Independent Modeling by Class Analogy		Modelado Independiente Suave por Analogía de Clase
<i>SNV</i>	Standard Normal Variate		Variable Normalizada
<i>SVM</i>	Support Vector Machines		Máquinas de Soporte Vectorial
<i>TSG</i>	Traditional Speciality Guaranteed	<i>ETG</i>	Especialidad Tradicional Garantizada

	Español		Inglés
<i>AGMI</i>	Ácidos Grasos Monoinsaturados	<i>MUFA</i>	MonoUnsaturated Fatty Acids
<i>AGP</i>	Ácidos Grasos Poliinsaturados	<i>PUFA</i>	PolyUnsaturated Fatty Acids
<i>AGS</i>	Ácidos Grasos Saturados	<i>SFA</i>	Saturated Fatty Acids
<i>DOP</i>	Denominación de Origen Protegida	<i>PDO</i>	Protected Designation of Origin
<i>ETG</i>	Especialidad Tradicional Garantizada	<i>TSG</i>	Traditional Speciality Guaranteed
<i>GCS</i>	Gradiente Conjugado Escalado	<i>SGC</i>	Scaled Conjugate Gradient
<i>IA</i>	Inteligencia Artificial	<i>AI</i>	Artificial Intelligence
<i>IGP</i>	Indicación Geográfica Protegida	<i>PGI</i>	Protected Geographical Indication
<i>RCS</i>	Recuento de Células Somáticas	<i>SCC</i>	Somatic Cell Count
<i>RNA</i>	Red Neuronal Artificial	<i>ANN</i>	Artificial Neural Network
<i>RNB</i>	Red Neuronal Biológica	<i>BNN</i>	Biological Neural Network
<i>UE</i>	Unión Europea	<i>EU</i>	European Union

I. ARTÍCULOS INCLUIDOS EN ESTA TESIS

La Tesis doctoral que aquí se presenta lo hace bajo la modalidad de Tesis por Compendio de Artículos.

De acuerdo a la normativa de la Universidad de Salamanca "*Procedimiento para la presentación de la Tesis Doctoral en la Universidad de Salamanca en el Formato de Compendio de Artículos /Publicaciones (Comisión de Doctorado y Posgrado, 15 de febrero de 2013)*" para la presente tesis se aportan tres artículos científicos publicados en revistas indexadas de los que el autor de la tesis es primer autor en dos de ellos.

Publicaciones indexadas en el Journal Citation Reports (JCR)

- **Prediction of Sensory Parameters of Cured Ham: A Study of the Viability of the Use of NIR Spectroscopy and Artificial Neural Networks.**

Sensors 2020, 20, 5624.

<https://doi.org/10.3390/s20195624>.

Autores (p.o. firma): Hernández-Ramos, P., Vivar-Quintana, A.M., Revilla, I., González-Martín., M.I., Hernández-Jiménez, M., Martínez-Martín, I.

- **Comparison of artificial neural networks and multiple regression tools applied to near infrared spectroscopy for predicting sensory properties of products from quality labels.**

Microchemical Journal, 159(2020), 105459.

<https://doi.org/10.1016/j.microc.2020.105459>.

Autores (p.o. firma): Hernández-Jiménez, M., Hernández-Ramos, P., Martínez-Martín, I., Vivar-Quintana, A.M., González-Martín., M.I., Revilla, I.

- **Estimation of somatic cell count levels of hard cheeses using physicochemical composition and artificial neural networks.**

J. Dairy Sci. (2019), 102, 1–11.

<https://doi.org/10.3168/jds.2018-14787>

Autores (p.o. firma): Hernández-Ramos, P., Vivar-Quintana, A.M., Revilla, I.

II. AUTORIZACIÓN DIRECTORAS DE TESIS

III. INFORME DE LA COMISIÓN ACADÉMICA
DEL PROGRAMA DE DOCTORADO DE
CIENCIA Y TECNOLOGÍA QUÍMICAS

IV. HIPÓTESIS DE PARTIDA Y OBJETIVOS

Hipótesis de partida y Objetivos

Hipótesis.

El sector de las Marcas de Calidad está en franco crecimiento a nivel europeo. Los alimentos acogidos a estas marcas presentan una calidad diferenciada, entendiéndose por ésta el conjunto de características peculiares y específicas de un alimento debidas al origen de las materias primas utilizadas y/o a los procedimientos de elaboración. Este sector tiene una gran importancia para el mantenimiento de la economía y la sostenibilidad de las zonas donde son producidos. Estos productos están regulados por la normativa de la Unión Europea (UE), que garantiza el cumplimiento de unos requisitos de calidad adicionales a los exigidos para otros alimentos. La política agrícola común (Common Agriculture Policy CAP) de la Unión Europea incluye, dentro de sus esquemas de calidad, proporcionar herramientas para ayudar a proteger y promover productos con características particulares ligadas a su origen geográfico, así como a ciertos productos tradicionales. Para ello, la UE ((CE) 1151/2012) regula los distintivos o logos de calidad denominados "Denominación de Origen Protegida (Protected Designation of Origin PDO)", "Indicación Geográfica Protegida (Protected Geographical Indication PGI)" y "Especialidad Tradicional Garantizada (Traditional Speciality Guaranteed TSG)", que pretenden asegurar a los consumidores que los productos acogidos a ellos son genuinos, proveyéndolos de una protección legal contra malos usos o falsificaciones y asegurando una reputación asociada al nombre.

Todas las empresas acogidas a estas designaciones deben comprometerse a mantener la calidad de sus productos, existiendo un organismo público regulador encargado de autorizar a exhibir el distintivo de calidad, tras la certificación de sus productos.

Por esta razón, para las empresas es necesario disponer de métodos, lo más objetivos y rápidos posibles, para la caracterización de sus materias primas y sus productos, así como herramientas que les permitan anticipar, si es posible, su calidad final.

Dentro de las técnicas analíticas que podrían ser aplicadas con este fin, se incluye la Espectroscopía del Infrarrojo Cercano (NIRS de Near InfraRed Spectroscopy) En este contexto y entre las metodologías que se han revisado, destaca especialmente esta tecnología por presentar las ventajas de ser rápida, no destructiva, y de requerir

escasa o nula preparación de la muestra. Además, es multiparamétrica (permite determinar varios parámetros simultáneamente partiendo de una misma medida) y no requiere reactivo alguno. Para conseguir extraer la máxima información de esta técnica es necesario combinarla con análisis multivariantes (de componentes principales (PCA), regresión por cuadrados parciales (PLS), redes neuronales artificiales (ANN), etc.).

Las ANN son una conocida herramienta matemática, ampliamente utilizada junto con la técnica NIRS, para la resolución de muchos problemas en la producción y tecnología de alimentos. También tienen por finalidad la determinación de patrones intrínsecos de comportamiento, o de asociación, entre los datos de entrada, tales que permitan estimar la salida deseada.

La Computación Neuronal se fundamenta en el estudio de las estructuras celulares neuronales y en la forma en la que éstas pueden almacenar algún tipo de información. Esto permite el estudio y la posterior creación de sistemas capaces de incorporar, a su comportamiento, la experiencia previa y el modo de trabajo del cerebro. Tales sistemas, inspirados en las Redes Neuronales Naturales o Biológicas, toman de ellas singularidades como el almacenamiento distribuido, el procesamiento paralelo y el aprendizaje adaptativo. Son, por lo tanto, sistemas de computación que modifican su comportamiento a partir de la experiencia y no a partir de una programación.

El uso de las ANN ha tenido gran repercusión en la industria de la alimentación, bien formando parte de otras técnicas de reconocimiento y clasificación, bien para la estimación de parámetros o de fraude (Almeida et al., 2012; Brezmes Llecha, 2001; Cevoli et al., 2011; Çinar et al., 2006; Francisco Sutil & Vega Cruz, 2002; Garcia et al., 2012; Garrigues Baixauli, 2013; Horiuchi et al., 2004; Kominakis et al., 2002; Millán Trujillo & Ostojich Cuevas, 2006; Peña et al., 2001; Vásquez-Villalobos & Lescano, 2010). Los métodos de inteligencia artificial también se han aplicado en la evaluación de la calidad sensorial de la carne, como la ternura (Chandraratne et al., 2006; Li et al., 1999, 2001; Tian et al., 2005), el color (Lu et al., 2000; Sheridan et al., 2007; Tan et al., 2000) o puntuación / nivel de marmoleo (Brethour, 1994) y en la predicción de parámetros sensoriales en aceite de oliva (Cancilla et al., 2014).

A partir de estos antecedentes, la **hipótesis de partida** de esta tesis doctoral es que las redes neuronales artificiales son una herramienta adecuada para la caracterización de alimentos acogidos a Marcas de Calidad, pudiendo complementar a la tecnología NIRS como herramienta de predicción y clasificación.

Objetivos.

Para dar respuesta a esta hipótesis se han planteado los siguientes objetivos:

- **Objetivo 1:** Construir un modelo de red neuronal que permita, con simples variaciones en su arquitectura, la clasificación de los alimentos conforme a criterios simples y combinados.
- **Objetivo 2:** Determinar la importancia que cada ítem de entrada a la red tiene en el proceso de clasificación de la misma. De esta forma se busca poder identificar los parámetros analizados con mayor incidencia en la diferenciación del producto.
- **Objetivo 3:** Optimizar la red neuronal artificial, en lo que a los parámetros significativos de su arquitectura se refiere, para dotarla de versatilidad en una implementación industrial.
- **Objetivo 4:** Analizar la bondad y robustez de las ANN para la predicción de parámetros que caracterizan los productos acogidos a Marcas de Calidad.

V. INTRODUCCIÓN

1. Marcas de Calidad Alimentaria

1.1. Concepto de Calidad Alimentaria

La calidad de un producto alimenticio es el resultado de su proceso de elaboración a lo largo de toda la cadena productiva y comercial, esto es, "desde la granja a la mesa". El concepto de calidad presenta dos niveles de concreción: uno básico que debe satisfacer todo alimento y es el referido a la calidad como resguardo de la inocuidad. Esto implica que el alimento no cause riesgos a la salud de la persona que lo consume y ello por contener concentraciones muy bajas, o estar libre, de productos químicos tóxicos o perniciosos a corto y medio plazo, adulterantes o contaminantes. Este nivel es generalmente controlado por el estado o país para resguardar la salud pública. El segundo nivel, por encima del anterior, en el que la calidad se define por los atributos de valor. Estos atributos son factores que diferencian los productos de acuerdo con sus características organolépticas (sabor, olor, textura y presentación), de composición, por las técnicas de elaboración aplicadas o los relacionados con la mera satisfacción del acto de alimentarse ligado a tradiciones socioculturales. En el contexto actual, otros aspectos como son los nutricionales o los funcionales (alimentos más sanos y nutritivos), el cuidado del medio ambiente, la ausencia del uso de fertilizantes o productos químicos, las condiciones sanitarias de los animales implicados en la cadena productiva, el cumplimiento de las leyes sociales de los trabajadores encargados de la producción o el respeto a las tradiciones en los alimentos elaborados por algún método tradicional, se han incorporado como atributos de valor de calidad alimentaria. Todo ello hace que el concepto de "calidad" de un alimento tenga una gran componente de subjetividad y que "calidad y "seguridad" estén claramente relacionados.

El consumidor del siglo XXI muestra una gran selectividad a la hora de realizar sus compras y un creciente interés por conocer aspectos sobre la naturaleza y origen del producto, métodos de producción y transformación, así como un respaldo de las características específicas que el alimento le ofrece. Cuando el etiquetado del producto alimenticio le ofrece garantías de que el producto corresponde a lo que él busca, está dispuesto a pagar un precio más alto por el mismo.

Los sellos de calidad presentes en el empaquetado del alimento, certifican un control del producto elaborado bajo el sello respectivo. El objetivo de los sellos, al amparo

de una legislación formulada en 1992 por la Unión Europea (UE), es la de proteger la legitimidad del producto en el ámbito europeo y homogeneizar prácticas que a nivel nacional existían para cada estado de la UE. De esta forma, los consumidores tienen la seguridad de estar comprando un producto genuino con características y atributos de valor añadido. Por su parte, los productores se benefician de la competencia leal, la protección contra imitaciones garantizando la originalidad y la promoción publicitaria de sus productos, aumentando su percepción visual y ligándolos a un entorno o características geográficas y de calidad.

1.2. Sellos de Calidad en la Unión Europea

En el año 1992 y como respuesta a las necesidades de consumidores y productores, la UE introdujo la normativa mediante la cual protege su patrimonio gastronómico destacando la diversidad de los productos y la calidad vinculada a su procedencia. Dicha normativa se refiere a la creación de tres etiquetas o sellos de calidad diferentes para los productos agrícolas y alimenticios típicos: Denominación de Origen Protegida (DOP), Indicación Geográfica Protegida (IGP) y Especialidad Tradicional Garantizada (ETG).



Imagen 1-1: Sellos de la Unión Europea para productos acogidos a DOP, IGP y ETG.

Las etiquetas o sellos de calidad de los productos agrícolas y alimentarios fueron creadas por la UE para "fomentar la diversidad de la producción agrícola y ganadera vinculada a su origen geográfico y al saber hacer tradicional, proteger los nombres de los productos contra el uso indebido y la imitación promoviendo sus características únicas y ayudar a los consumidores dándoles información sobre el carácter específico de los productos". Constituyen una herramienta que orienta al consumidor en la toma de sus decisiones en la compra de un producto alimenticio.

La UE, a través de su política de calidad de los productos agrícolas y del establecimiento de los sellos de calidad añade, a los prerrequisitos básicos en los alimentos (como son los nutricionales, de seguridad y organolépticos), los siguientes criterios:

- Características específicas de producción, con frecuencia ligadas al origen geográfico o región de producción, la alimentación animal o los métodos de producción.
- Ingredientes especiales.
- Métodos de producción particulares, generalmente como resultado de las tradiciones o experiencias locales.
- Procesamiento, preparación, presentación y etiquetado de forma que destaquen las características propias del producto hacia los consumidores.

Los reglamentos europeos vigentes para los productos alimenticios objeto de esta tesis son:

- Reglamento (UE) nº 1151/2012 de 21 de noviembre de 2012 ("EUR-Lex - 32012R1151 - ES - EUR-Lex,") para regular los productos acogidos a los sellos DOP, IGP y ETG y cuya última versión consolidada es de 14 de diciembre de 2019 ("EUR-Lex - 02012R1151-20191214 - ES - EUR-Lex,") y que deroga los Reglamentos (CEE) nº 510/2006 y (CEE) nº 509/2006
- Reglamento Delegado (UE) nº 664/2014 de 18 de diciembre de 2013 («EUR-Lex - 32014R0664 - ES - EUR-Lex») por el que se completa el Reglamento (UE) nº 1151/2012 y que deroga los Reglamentos (CEE) nº 1898/2006 y (CEE) nº 1216/2007
- Reglamento de Ejecución (UE) nº 668/2014 de 13 de junio de 2014 («EUR-Lex - 32014R0668 - ES - EUR-Lex») que establece las normas de desarrollo del Reglamento (UE) nº 1151/2012

De los sellos reconocidos por la UE que son de interés para esta tesis, dos de ellos se relacionan con el territorio (DOP e IGP) enalteciendo las cualidades excepcionales de los productos en cuanto a sabor y aroma, así como los métodos tradicionales de elaboración, creando vínculos de confianza entre consumidor, producto, el lugar de donde es originario y las personas que allí viven y que los producen. Estos sellos identifican diferentes niveles de relación con un área geográfica. Las diferencias entre estos dos sellos tienen que ver, fundamentalmente, con la cantidad de materias primas para la elaboración del producto que deben proceder de la zona referenciada, o de las partes del proceso de producción que han de tener lugar en la región específica. En el caso de la DOP, materias primas y partes del proceso han de ser todos originarios de la región, mientras que en la IGP no es obligatorio que sea en todos los casos.

El tercer sello (ETG) se relaciona con el método particular de producción, que hace que los productos acogidos a este sello posean alguna cualidad determinada, reputación u otra característica que los diferencie de otros productos de su misma categoría, pudiendo ser producidos en cualquier zona geográfica, ya que las especificaciones técnicas están disponibles para todos los productores.

1.2.1. Denominación de Origen Protegida (DOP)

Las características más significativas de los productos alimenticios acogidos bajo este sello son:

- Garantiza que el producto que lleva este sello ha sido producido, transformado y elaborado en una zona geográfica determinada, con conocimientos específicos reconocidos y controlados y con todas las materias primas procedentes de la misma zona.
- Sus características son posibles gracias al entorno geográfico natural y a las habilidades de los productores de esa región.
- Todas las fases del proceso de producción deben ser realizadas en el territorio que le da su nombre.

Así, la DOP marca una diferenciación con respecto a otros productos alimenticios similares, producidos en otras regiones, para los que se cambia alguna de las materias primas por otra de características similares, o se reemplaza alguna etapa del proceso de producción por técnicas de industrialización que permitan su consumo en forma masiva.

1.2.2. Indicación Geográfica Protegida (IGP)

Las características más significativas de los productos alimenticios acogidos bajo este sello son:

- Garantiza que el producto que lleva este sello presenta un vínculo con el medio geográfico en al menos una de las etapas de su desarrollo: producción, transformación o elaboración.
- Su calidad, su reputación o la característica específica es atribuible a un área geográfica determinada.
- Como mínimo, una etapa del proceso de producción se realiza en el área geográfica que le da su nombre.

- Las materias primas utilizadas en la producción pueden provenir de otra región.

Los pliegos de condiciones de estos sellos disponen que en ellos debe aparecer:

- Nombre con la denominación de origen o indicación geográfica.
- Descripción del producto con las materias primas y las principales características físicas, químicas, microbiológicas u organolépticas del producto.
- Delimitación de la zona geográfica donde se realiza la transformación del producto, así como de las zonas de producción de las materias primas (opcional).
- Descripción del método seguido para la obtención del producto.
- Elementos clave que acrediten que el producto es originario de la zona geográfica.
- Pueden aparecer otras consideraciones como aquellas que justifiquen:
 - Vínculo entre las características y el origen geográfico.
 - Nombre y dirección de las autoridades verificadoras y sus funciones específicas.
 - Normas específicas de etiquetado.
 - Otros requisitos comunitarios o nacionales.

1.2.3. Especialidad Tradicional Garantizada (ETG)

Las características más significativas de los productos alimenticios acogidos bajo este sello son:

- Garantiza que el producto que lleva este sello presenta una composición tradicional o está elaborado según un método de producción tradicional.
- Las características son dadas por el uso de materias primas tradicionales, su composición o bien por su elaboración con métodos tradicionales o artesanales.
- Alguna de las etapas de su desarrollo: producción, transformación o elaboración se realiza en la zona geográfica de la que toma su nombre, pudiendo no estar el resto vinculadas a la zona geográfica específica. No tienen, por tanto, una zona geográfica delimitada.

- Cualquier productor puede elaborarlos siguiendo las especificaciones registradas.

La ETG no protege un nombre geográfico, sino el nombre de un producto. Es, por tanto, una acreditación que reconoce a un producto (agrícola o alimenticio) que se produce a partir de materias primas tradicionales o que presenta una composición, modo de producción o transformación de tipo tradicional.

Los pliegos de condiciones de este sello disponen que en él debe aparecer:

- El nombre del producto el cual debe ser específico y que exprese las características del producto.
- La descripción del producto donde se han de reflejar las principales características físicas, químicas, microbiológicas u organolépticas del producto.
- La descripción del método de producción y de elaboración del producto.
- Los elementos clave que acrediten:
 - Sus características específicas que lo definen.
 - Su carácter tradicional.
- Otros requisitos mínimos y procedimientos de control que aseguren las características específicas.

La UE protege jurídicamente contra imitaciones, dentro de Europa y en aquellos otros países no adheridos a la UE con los que se haya establecido un acuerdo específico, los nombres de los productos con calidad diferenciada registrados voluntariamente y ello como parte del modelo de Derechos de Propiedad Intelectual (DPI) desarrollado en el seno de la UE. Cada país de la UE debe adoptar las medidas necesarias para proteger los nombres registrados en su territorio, impidiendo, persiguiendo y deteniendo la producción y/o comercialización ilícita de cualquier producto amparado por cualquiera de los regímenes de calidad establecidos. Las autoridades nacionales competentes de cada país adherido a la UE han de aceptar y adaptar las normativas nacionales a las establecidas por la UE. Además, el logotipo o sello comunitario es el distintivo que puede ser utilizado en el empaque del producto acreditado, como garantía del cumplimiento de exigencias adicionales a las de la calidad básica obligatorias para todos los alimentos.

Los nombres de productos no europeos también pueden registrarse siempre y cuando exista un acuerdo bilateral, entre el país o región de origen y la UE, que incluya la protección recíproca de esos nombres. Puede comprobarse que así ha sido con los nombres de varios productos (alimentos, vino, vinos aromatizados y bebidas espirituosas) elaborados en diversos países no pertenecientes a la UE, como Colombia, Brasil, EE.UU, China, Marruecos, Turquía, India o Noruega.

1.3. Productos alimenticios acogidos a Sellos de Calidad en la Unión Europea

La UE ha centralizado todos los términos protegidos por indicaciones geográficas DOP e IGP y por la mención ETG en una única base de datos a la que ha denominado como "eAmbrosia" - Registro de Indicaciones Geográficas de la UE, de la Dirección General de Agricultura y Desarrollo Rural de la Comisión Europea («eAmbrosia. Registro de Indicaciones Geográficas de la UE.»). Hasta ahora, los productos a los que se aplicaban estos reconocimientos, estaban en tres bases de datos diferentes: e-Spirit-Drinks (bebidas espirituosas), DOOR (alimentos) y e-Bacchus (vino).

Según los datos proporcionados por eAmbrosia y a fecha de 23 de abril de 2021, actualmente se encuentran registrados 3835 productos, de los cuales 1834 son productos alimenticios distribuidos en 737 bajo el sello de D.O.P., 1017 como I.G.P. y 80 bajo el sello E.T.G. También se encuentran registrados 1721 vinos, 275 bebidas espirituosas y 5 vinos aromatizados. No obstante, no todos los productos registrados son de miembros de la UE.

Los productos registrados en la base de datos eAmbrosia, no pertenecientes a bebidas espirituosas, vinos o vinos aromatizados, se distribuyen entre las siguientes clases dentro de los sellos DOP-IGP y ETG:

- 1.1.- Carne fresca (y despojos) (DOP-IGP y ETG)
- 1.2.- Productos cárnicos (cocidos, en salazón, ahumados, etc.) (DOP-IGP y ETG)
- 1.3.- Quesos (DOP-IGP y ETG)
- 1.4.- Otros productos de origen animal (huevos, miel, lácteos salvo la mantequilla, etc.) (DOP-IGP y ETG)
- 1.5.- Aceites y grasas (mantequilla, margarina, aceite, etc.) (DOP-IGP y ETG)
- 1.6.- Frutas, hortalizas y cereales frescos o transformados (DOP-IGP y ETG)
- 1.7.- Pescado, moluscos y crustáceos frescos y productos derivados de ellos (DOP-IGP y ETG)
- 1.8.- Otros productos del anexo I del Tratado (especies, etc.) (DOP-IGP y ETG)
- 2.1.- Cerveza (DOP-IGP)

-
- 2.2.- Chocolate y productos derivados (DOP-IGP)
 - 2.3.- Productos de panadería, pastelería, repostería y galletería (DOP-IGP)
 - 2.4.- Bebidas a base de extractos de plantas (DOP-IGP)
 - 2.5.- Pastas alimenticias (DOP-IGP)
 - 2.6.- Sal (DOP-IGP)
 - 2.7.- Gomas y resinas naturales (DOP-IGP)
 - 2.8.- Pasta de mostaza (DOP-IGP)
 - 2.9.- Heno (DOP-IGP)
 - 2.10.- Aceites esenciales (DOP-IGP)
 - 2.11.- Corcho (DOP-IGP)
 - 2.12.- Cochinilla (producto bruto de origen animal) (DOP-IGP)
 - 2.13.- Flores y plantas ornamentales (DOP-IGP)
 - 2.14.- Algodón (DOP-IGP)
 - 2.15.- Lana (DOP-IGP)
 - 2.16.- Mimbre (DOP-IGP)
 - 2.17.- Lino espadillado (DOP-IGP)
 - 2.18.- Cuero (DOP-IGP)
 - 2.19.- Piel (DOP-IGP)
 - 2.20.- Plumas (DOP-IGP)
 - 2.21.- Platos preparados (ETG)
 - 2.22.- Cervezas (ETG)
 - 2.23.- Chocolate y productos derivados (ETG)
 - 2.24.- Productos de panadería, pastelería, repostería y galletería (ETG)
 - 2.25.- Bebidas a base de extractos de plantas (ETG)
 - 2.26.- Pastas alimenticias (ETG)
 - 2.27.- Sal (DOP-IGP) (ETG)

El mayor % de los registros en eAmbrosia se refiere a vinos seguido de alimentos acogidos a IGP y DOP. Esta situación es la misma considerando únicamente los productos acogidos bajo los sellos IGP, DOP, y ETG y ello tanto para los productos elaborados en los países adheridos a la UE, como para los productos elaborados en países no pertenecientes a la UE (Imagen 1-2). Es muy significativo el bajo número de registros relativos a productos acogidos bajo el sello ETG entre todos los países, así como el intercambio tan significativo de las proporciones de productos acogidos bajo el sello IGP y los vinos registrados, entre los países pertenecientes a la UE y los no pertenecientes a dicha organización.

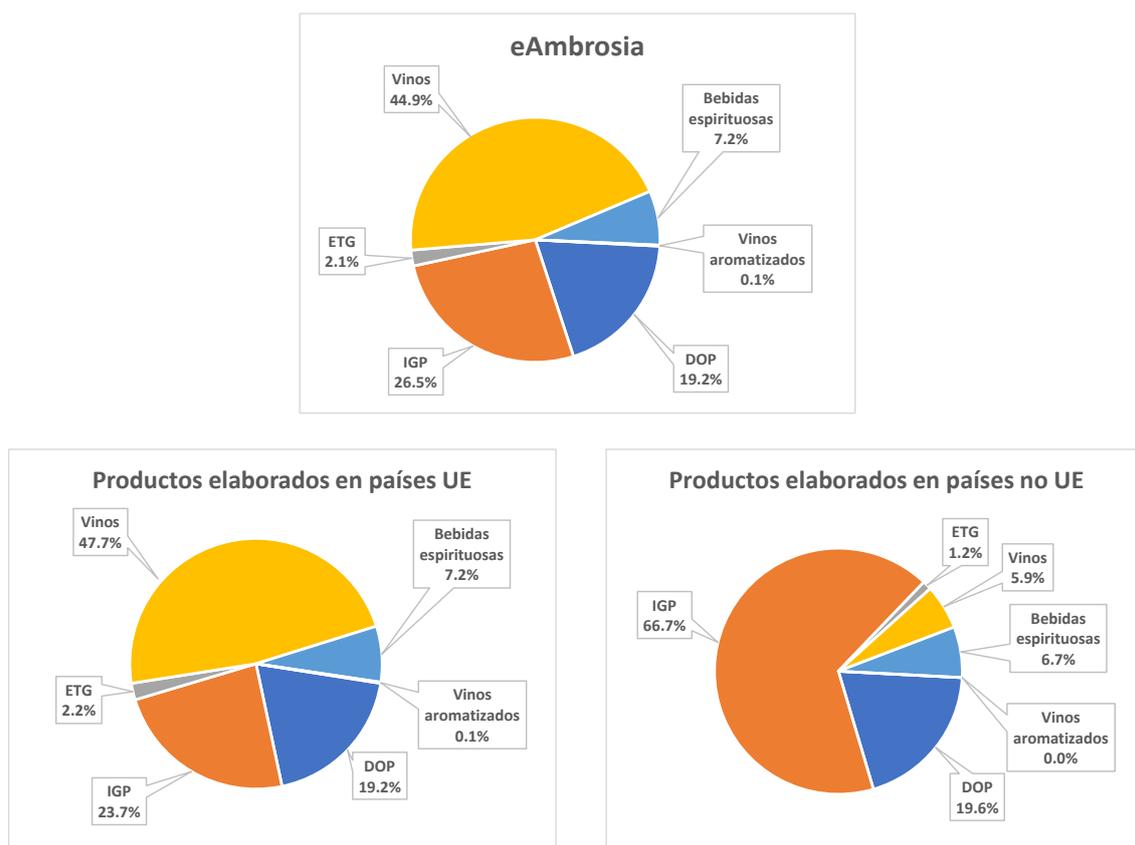


Imagen 1-2: Distribución de registros en eAmbrosia por categoría y por pertenencia a la UE

Realizando un análisis por países y centrandó la atención únicamente en los productos alimenticios (Tabla 1-2), los resultados muestran que el mayor número de nombres de productos se registra con la etiqueta IGP (847 entradas), seguida de cerca por la etiqueta DOP (687 entradas) y con un reducido número de productos bajo el sello ETG (77). El país dominante es Italia, seguido de otros países mediterráneos como Francia, España, Portugal, Grecia y Alemania por este orden.

También se puede apreciar como los países mediterráneos (Italia, Francia, España, Portugal y Grecia) acaparan el 69.7% de los registros destacando los correspondientes a productos con sello DOP (82.4%) e IGP (64.0%), frente al porcentaje mucho más reducido de ETG (19.5%). No obstante, los valores antes indicados son absolutos. En este sentido es muy interesante el estudio realizado por Tomáš Sadílek (2020) en el que se comparan el número de registros según la población del país ($n^{\circ}/10^6$ hab), su tamaño geográfico ($n^{\circ}/1000$ km²), la extensión de tierras cultivables ($n^{\circ}/1000$ km²) o el número de explotaciones agrarias (agrícolas y ganaderas) ($n^{\circ}/1000$ explot.). En estos casos los países que destacarían serían Luxemburgo, Chipre, Letonia, Eslovenia, Eslovaquia y Chequia.

Tabla 1-1: Distribución de sellos por país

País	DOP	IGP	ETG	TOTAL	País	DOP	IGP	ETG	TOTAL
Italia	184	154	6	344	Eslovaquia	2	12	7	21
Francia	112	160	2	274	Países Bajos	6	5	4	15
España	116	112	4	232	Irlanda	5	8	0	13
Portugal	73	81	2	156	Finlandia	5	3	4	12
Grecia	81	35	1	117	Chipre	2	9	0	11
Alemania	12	90	0	102	Rumanía	1	9	1	11
Polonia	10	24	10	44	Bulgaria	3	2	5	10
Croacia	18	23	0	41	Letonia	2	3	5	10
Chequia	6	25	5	36	Lituania	1	7	2	10
Hungría	9	22	2	33	Dinamarca	0	8	0	8
Eslovenia	11	13	4	28	Luxemburgo	3	4	0	7
Suecia	10	15	2	27	Estonia	0	1	0	1
Bélgica	4	16	5	25	Malta	0	0	0	0
Austria	11	6	6	23	TOTAL	687	847	77	1611

Sin embargo, la distribución de los productos según los sellos de calidad de la UE es diferente entre los países. Italia, España y Grecia, presentan un mayor porcentaje de productos registrados bajo el sello DOP, mientras que Francia y Portugal lo hacen con el sello IGP. Italia es el país con el mayor número de productos registrados con DOP (184), mientras que Francia lo es con los productos registrados con IGP (160). En cuanto a los productos registrados como ETG, el país con mayor número de productos registrados es Polonia (10), seguido de Eslovaquia (7). Es destacable el hecho de que el 29.6% de los miembros de la UE no tienen ningún producto registrado como ETG. España, con sus 232 productos registrados, figura en 3ª posición siendo la 2ª en productos con DOP (116 registros), la 3ª en IGP (112 registros) y la 9ª en ETG (4 registros) junto a Eslovenia, Países Bajos y Finlandia. (Albuquerque, Oliveira, & Costa, 2018)

La razón del mayor número de productos registrados en Italia, Francia, España, Portugal y Grecia, podría encontrarse en las características de su clima, su suelo y las condiciones naturales idóneas para la producción de productos alimentarios de alta calidad, como el aceite de oliva, frutas, verduras, cereales, queso, vino o los productos cárnicos. A ellos habría que añadir el desarrollo de factores tecnológicos, normalmente aplicados a la elaboración de los quesos registrados, fruto de la necesidad de adaptación o como reacción a las necesidades del cliente. Además, también parece influir el mayor nivel de concienciación en el sur de Europa, en comparación con otras regiones del viejo continente, en lo que respecta al concepto de "marcas de calidad colectivas", las cuales parecen ser bien conocidas en los países mediterráneos y donde los productores muestran cierta sensibilidad a la creación de consorcios para el registro de sus productos. A ello hay que añadir el fuerte respaldo

institucional, la importancia del mantenimiento de cercanía a la tierra y de las tradiciones y las celebraciones socioculturales, muy ligadas a la alimentación, que estos países demuestran. (Sadilek T., 2020).

1.4. Productos alimenticios de España acogidos a Sellos de Calidad en la Unión Europea

En la base de datos eAmbrosia figuran un total de 232 productos alimenticios españoles acogidos a los tres sellos de calidad. De ellos, 116 (50%) están bajo el sello de DOP, 112 (48.3%) bajo el sello IGP y únicamente 4 bajo el de ETG (1.7%).

Atendiendo a la distribución por clase (Imagen 1-3), el mayor número de productos acogidos a un sello de calidad son los correspondientes a la clase 1.6 "Frutas, hortalizas y cereales frescos o transformados" que lo están al sello de IGP (45 productos), seguido de los de la clase 1.5 "Aceites y grasas (mantequilla, margarina, aceite, etc.)" con sello de DOP (33 productos). Finalmente están los productos de las clases 2.3 y 2.24 "Productos de panadería, pastelería, repostería y galletería" con el sello de ETG (2 productos).

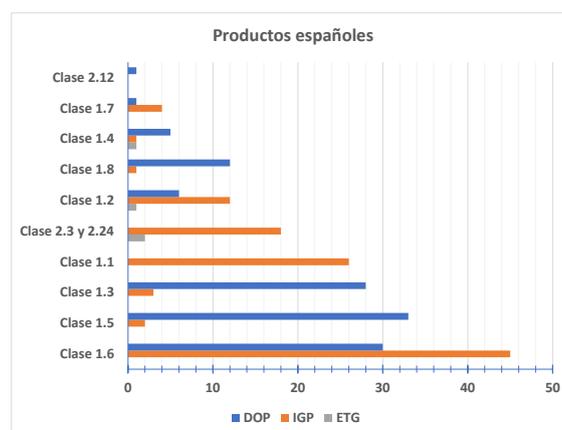


Imagen 1-3: Distribución de sellos por clase de alimento de los productos españoles en eAmbrosia (Sólo se han representado aquellos productos que presentan al menos una entrada)

En relación a esta tesis, son objeto de ella únicamente los productos clasificados como clases "1.2. Productos cárnicos (cocidos, en salazón, ahumados, etc.)" para los que se han encontrado 19 registros (6 productos con DOP, 12 con IGP y 1 con ETG) y "1.3. Quesos" con 31 registros (28 productos con DOP y 3 bajo el sello IGP). En adelante sólo se estudiarán dichos productos.

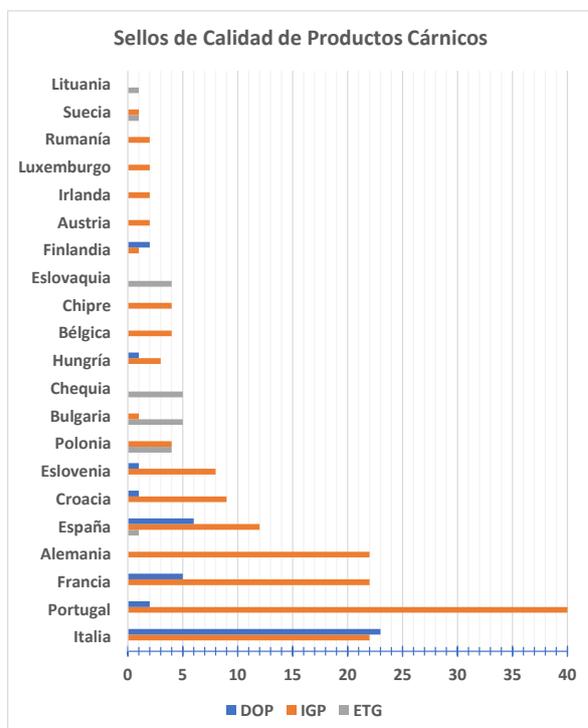
1.4.1. Sellos de Calidad para Productos Cárnicos de España

Si se analiza los productos con sellos de calidad correspondientes a la clase 1.2 Productos cárnicos (cocidos, en salazón, ahumados, etc.) considerados en eAmbrosia, se obtendría la siguiente tabla (Tabla 1-3).

Tabla 1-2: Distribución de sellos para los productos cárnicos (clase 1.2)

Clase 1.2	eAmbrosia	Países no UE	Países UE	España
D.O.P.	40	0	40	6
I.G.P.	174	13	161	12
E.T.G.	17	0	17	1
TOTAL	231	13	218	19

De la tabla anterior se deduce que el 100% de los registros en eAmbrosia con sello de DOP, corresponden a productos elaborados en países pertenecientes a la UE y que de ellos el 15% son elaborados en España. Ocurre lo mismo con los productos acogidos al sello ETG (100% elaborados dentro de la UE) y donde España aporta sólo el 5.9% de los productos. En el caso del sello de IGP, hay una pequeña representación de los países no pertenecientes a la UE con un 7.5% de productos con este sello. España aporta el mismo porcentaje (7.5%) respecto de la totalidad de los productos con el sello IGP elaborados dentro de la UE.



Atendiendo a la distribución de los sellos respecto de los países pertenecientes a la UE (Imagen 1-4), España aparece en la 5ª posición con 19 productos. Le preceden Italia (45 productos), Portugal (42 productos), Francia (27 productos) y Alemania (22 productos). Significativamente por debajo están Croacia (10 productos) y Eslovenia (9 productos) a los que siguen el resto de los países con valores menores.

Imagen 1-4: Distribución de sellos de productos cárnicos por países en eAmbrosia (Sólo se han representado los países para los que existe al menos una entrada)

Con respecto a los productos españoles de esta clase, aparecen los enumerados en la siguiente tabla (Tabla 1-3). En dicha tabla es de mencionar el hecho de que el Jamón de Teruel presenta dos entradas por su reciente solicitud de cambio en el pliego de condiciones de la DOP, así como el hecho de que las DOP "Jabugo" y "Guijuelo" son denominaciones "Supra-Autonómicas", es decir, que su identidad geográfica afecta a más de una comunidad autónoma.

Tabla 1-3: Productos cárnicos españoles (clase 1.2), acogidos a Marcas de Calidad

Nombre Producto	Sello	Fecha
Jamón de Teruel / Paleta de Teruel*	DOP	15/02/2021
Morcilla de Burgos	IGP	05/09/2018
Jamón Serrano*	IGP	26/09/2016
Jamón de Serón	IGP	14/08/2014
Chorizo de Cantimpalos	IGP	01/06/2011
Chosco de Tineo	IGP	19/02/2011
Los Pedroches	DOP	03/09/2010
Chorizo Riojano	IGP	25/03/2010
Jamón de Trevélez	IGP	15/11/2005
Salchichón de Vic / Llonganissa de Vic	IGP	29/12/2001
Botillo del Bierzo	IGP	10/10/2001
Lacón Gallego	IGP	08/05/2001
Jamón Serrano	ETG	13/11/1999
Jabugo	DOP	27/01/1998
Dehesa de Extremadura	DOP	21/06/1996
Guijuelo	DOP	21/06/1996
Jamón de Teruel / Paleta de Teruel	DOP	21/06/1996
Sobrasada de Mallorca	IGP	21/06/1996
Cecina de León	IGP	21/06/1996

(* Productos para los que se ha presentado solicitud de asignación)

1.4.2. Sellos de Calidad para Quesos de España

Los productos con sellos de calidad correspondientes a la clase 1.3 Quesos, se recogen en la Tabla 1-4.

Tabla 1-4: Distribución de sellos para los quesos (clase 1.3)

Clase 1.3	eAmbrosia	Países no UE	Países UE	España
D.O.P.	209	10	199	28
I.G.P.	59	7	52	3
E.T.G.	8	0	8	0
TOTAL	276	17	259	31

De la tabla anterior se deduce que el 95.2% de los registros en eAmbrosia con sello de DOP, corresponden a productos elaborados en países pertenecientes a la UE y que, de estos últimos, aproximadamente el 14.1% son elaborados en España. En el caso del sello de IGP, el 88.1% de los productos registrados han sido elaborados dentro de la UE. España aporta, a los anteriores, una pequeña representación con un 5.8% de productos. En relación al minoritario sello de ETG, el 100% de los registros pertenece a países de la UE no siendo ninguno de ellos España.

España, en el contexto de la Unión Europea (Imagen 1-5), se sitúa en 3ª posición con 31 productos. Le preceden únicamente Italia (62 productos) y Francia (55 productos). Por debajo se encuentra Grecia (23 productos) y significativamente por debajo Portugal y Eslovaquia con 13 y 10 productos respectivamente.

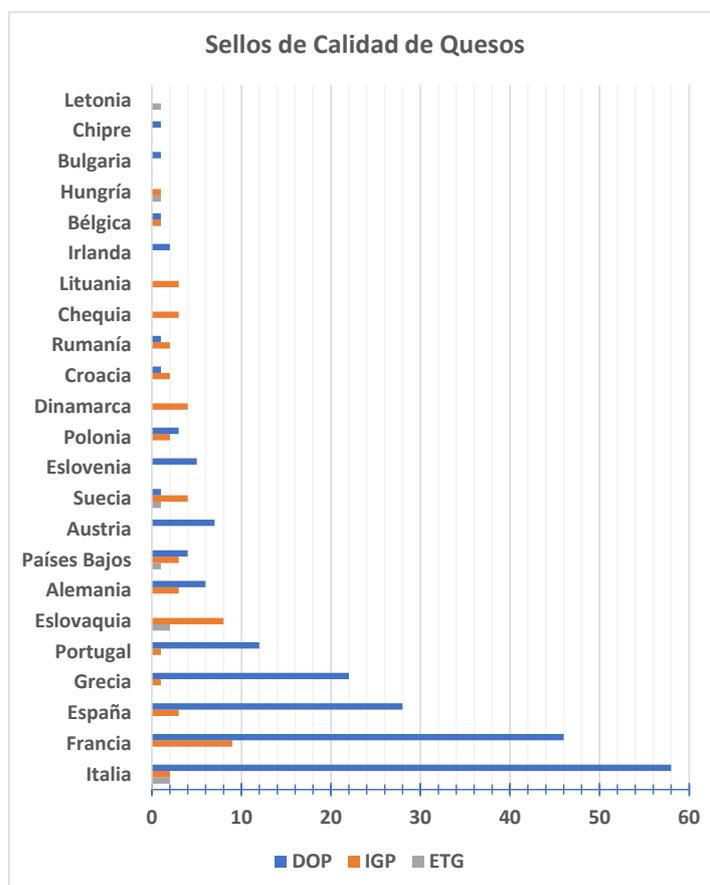


Imagen 1-5: Distribución de sellos de Quesos por países en eAmbrosia (Sólo se han representado los países para los que existe al menos una entrada)

Con respecto a los productos españoles de esta clase, en la base de datos eAmbrosia aparecen los enumerados en la Tabla 1-5.

Tabla 1-5: Productos españoles (clase 1.3) en eAmbrosia

Nombre Producto	Sello	Fecha
Cebreiro*	DOP	16/02/2021
Queso de Acehúche*	DOP	14/07/2020
Queso Castellano	IGP	25/02/2020
Queso Los Beyos	IGP	08/11/2013
Queso Camerano	DOP	11/12/2012
Queso Casín	DOP	05/10/2011
Queso de Flor de Guía / Queso de Media Flor de Guía / Queso de Guía	DOP	04/09/2010
Arzúa-Ulloa	DOP	13/01/2010
San Simón da Costa	DOP	11/12/2008
Cebreiro	DOP	17/10/2008
Afuega'l Pitu	DOP	26/07/2008
Gamoneu / Gamonedo	DOP	17/07/2008
Queso Ibores	DOP	05/02/2005
Queso de Valdeón	IGP	28/01/2004
Torta del Casar	DOP	26/08/2003
Queso Palmero / Queso de la Palma	DOP	11/07/2002
Queso de Murcia	DOP	25/06/2002
Queso de Murcia al vino	DOP	25/06/2002
Queso de l'Alt Urgell y la Cerdanya	DOP	07/11/2000
Queso Majorero	DOP	20/02/1999
Cabrales	DOP	21/06/1996
Idiazabal	DOP	21/06/1996
Mahón-Menorca	DOP	21/06/1996
Picón Bejes-Tresviso	DOP	21/06/1996
Queso Nata de Cantabria	DOP	21/06/1996
Queso de La Serena	DOP	21/06/1996
Queso Manchego	DOP	21/06/1996
Queso Tetilla / Queixo Tetilla	DOP	21/06/1996
Queso Zamorano	DOP	21/06/1996
Quesucos de Liébana	DOP	21/06/1996
Roncal	DOP	21/06/1996

(* Productos para los que se ha presentado solicitud de asignación)

La DOP "Cebreiro" aparece con más de una entrada por su reciente solicitud de cambio en el pliego de condiciones de la DOP. Así mismo, las DOP "Idiazabal" y

“Queso Los Beyos” son denominaciones “Supra-Autonómicas”, por lo que su identidad geográfica afecta también a más de una comunidad autónoma.

1.5. Legislación y otras marcas de calidad alimentaria en España

En España, además de las DOP, IGP y ETG existen otros distintivos o sellos de calidad que son contemplados a nivel regional por organismos de carácter público (Gobiernos Regionales, Diputaciones...) o privado. Estas marcas amparan diferentes tipos de alimentos con el objetivo de promocionar los productos agrarios y pesqueros de cada zona.

En el caso de los productos alimenticios relacionados con esta tesis, a los productos con sellos DOP, IGP y ETG de las Tabla 1-3 y Tabla 1-5, habría que añadir los incluidos en la Tabla 1-6, correspondientes a los productos con la etiqueta Marca de Garantía.

Tabla 1-6: Productos españoles (clases 1.2 y 1.3) acogidos a Marca de Garantía (CyL)

Nombre Producto	Sello	Fecha
Productos clase 1.2		
Cecina de chivo de Vegacervera	Marca de Garantía	2005
Chorizo zamorano	Marca de Garantía	2005
Chorizo de León*	Marca Colectiva	
Ibéricos de Salamanca	Marca de Garantía	2001
Torrezno de Soria	Marca de Garantía	2010
Productos clase 1.3		
Queso Arribes de Salamanca	Marca de Garantía	2002

(Elaboración propia a partir de («ITACyL - Instituto Tecnológico Agrario de Castilla y León»)

Las Marcas de Calidad constituyen el primer marco normativo autonómico para las figuras agroalimentarias de calidad diferenciada de Castilla y León. Para poder hacer efectivo su registro en la Oficina Española de Patentes y Marcas, debe tener previamente un informe favorable al Reglamento de Uso emitido por el Instituto Tecnológico Agrario de Castilla y León. Este reglamento se completa con el Certificado de Conformidad de Producto, emitido por una entidad de certificación encargada de inspeccionar y verificar el cumplimiento de lo establecido en el Reglamento de Uso de la Marca de Calidad de acuerdo con la Norma Europea EN/45011.

1.6. Consumo alimentario en España

El último análisis anual del consumo alimentario en España, efectuado de forma completa por el gobierno, es el correspondiente a 2019 («Series anuales»). Debido al confinamiento por la crisis sanitaria del COVID-19, los datos sobre alimentación del 2020 no son buenos marcadores de tendencia.

Del análisis de los datos, se puede apreciar que hay una ligera bajada en la cantidad de alimentos consumidos en España en los últimos 3 años del periodo estudiado, que no se ve reflejada en el gasto efectuado por los españoles en el mismo periodo, donde se percibe un claro incremento en el coste de la alimentación (Imagen 1-6a).

Analizando los consumos de los alimentos que son objeto de la presente tesis doctoral, se observa que la evolución del consumo de jamones, chorizos y quesos han sido paralelas. Se percibe un ligero estancamiento en el consumo de jamones y chorizos, pero no así en el queso, así como un ligero incremento en el gasto alimentario en jamones y quesos, tendencia que no aparece en el caso de los chorizos. (Imagen 1-6b y c)

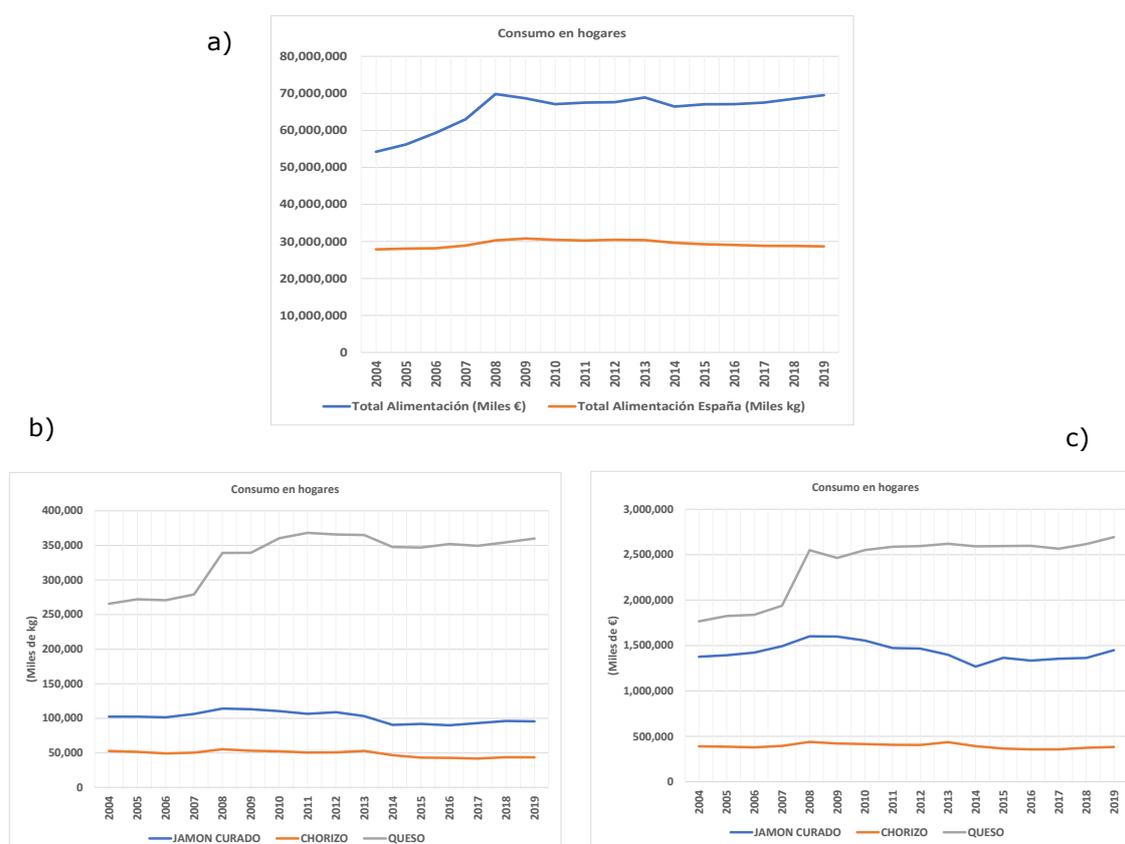


Imagen 1-6: Evolución del consumo alimentario en España

En lo que respecta a la participación de cada clase en el cómputo global de la alimentación, el consumo de los alimentos de las clases 1.2 (Productos cárnicos cocidos, en salazón, ahumados...) y 1.3 (Quesos), supone el 6.51% del coste en alimentación y el 1.74% del peso. De la distribución de cada producto se percibe el mayor consumo de queso sobre los correspondientes al jamón y el chorizo, así como el gasto unitario del jamón, en detrimento del valor atribuible al queso (Imagen 1-7)

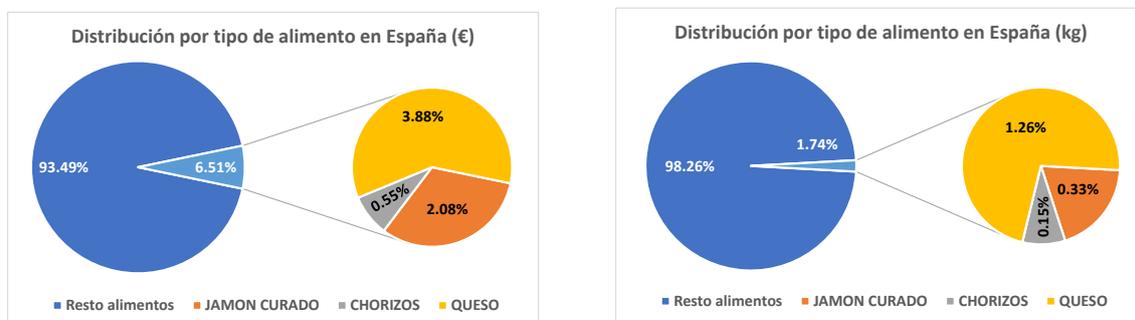


Imagen 1-7: Distribución de la alimentación en España

Analizando los consumos por comunidad autónoma, la de Castilla y León consume el 5.40% de toda la alimentación de España. Incluyendo la variable del producto, Castilla y León se sitúa en la 5ª, 6ª y 7ª posiciones de consumo para el jamón curado (5.31%), chorizo (8.23%) y queso (4.65%). Como es lógico, las comunidades que ocupan las primeras posiciones son las de Andalucía, Cataluña y la Comunidad de Madrid, seguidas muy de cerca por la Comunidad Valenciana para el caso del jamón curado y el queso o Galicia para el caso del chorizo. Estas comunidades consumen el 60.46% del jamón curado, el 51.19% del chorizo y el 57.97% del queso que se consumen en los hogares de España. Para todos los casos, la comunidad que se encuentran a la cola en lo que al consumo de estos productos se refiere es La Rioja, en cuyos hogares sólo se consume el 0.69% del jamón curado, el 0.92% del chorizo y el 0.55% del queso consumidos en España. (Imagen 1-8).

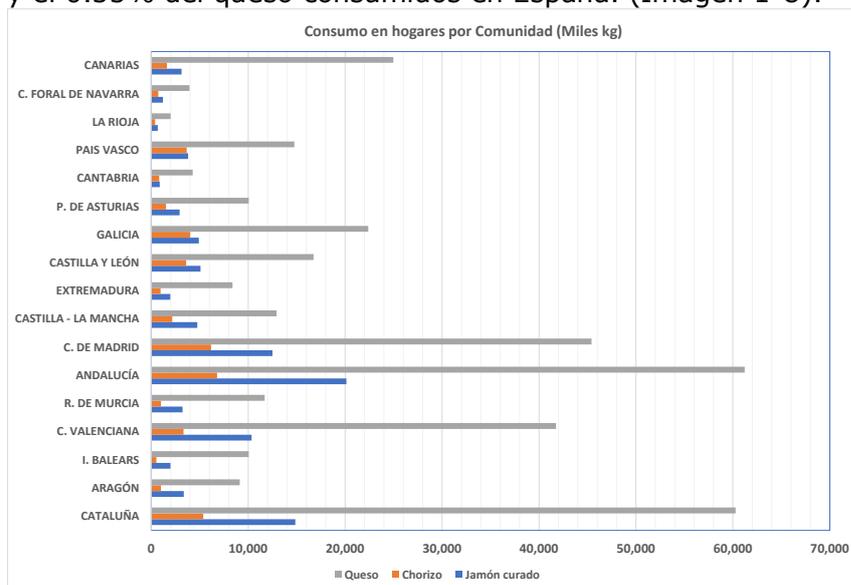


Imagen 1-8: Distribución por comunidad del consumo alimentario en España

2. Redes Neuronales Artificiales

2.1. Introducción

En todas las ciencias experimentales surge el problema de tratar de explicar los datos observados en los fenómenos naturales. Además, es conveniente obtener un modelo matemático que permita predecir la salida del sistema natural, a partir de nuevas entradas, o tipificar los datos de entrada según un espacio categorizado. Esta labor no es especialmente fácil cuando los datos observados son muy numerosos o presentan relaciones no lineales o patrones no conocidos. Una de las técnicas estadísticas empleadas para el tratamiento de datos multivariantes, que permite obtener un modelo que explique los resultados obtenidos, la identificación de patrones o similitudes de tendencia o la predicción de parámetros, es el empleo de una Red Neuronal Artificial (RNA o ANN por sus siglas en inglés de Artificial Neural Network).

Las ANN se engloban dentro de la "Inteligencia Artificial" (IA o AI por sus siglas en inglés de Artificial Intelligence) y más concretamente dentro de las disciplinas de la Computación Neuronal, Neurocomputación, Conexionismo o la Computación Masivamente Distribuida.

Aunque los equipos informáticos actuales son capaces de realizar operaciones a gran velocidad, siguiendo un esquema secuencial de instrucciones para procesar los datos, presentan grandes dificultades para abordar problemas que requieran un alto grado de procesamiento paralelo. Problemas de este tipo son los que abordan el reconocimiento de formas y patrones o aquellos que han de extraer relaciones inherentes entre grandes volúmenes de datos. La solución del problema pasa por la emulación del cerebro humano el cual, conectado a órganos sensoriales y elementos motores, es capaz de generar sus propias reglas de actuación inferidas a partir de la experiencia previa. (Corchado et al., 2000)

La Computación Neuronal se fundamenta en el estudio de las estructuras celulares neuronales y la forma en la que éstas pueden almacenar algún tipo de información, creando sistemas capaces de incorporar a su comportamiento, la experiencia y conocimiento previos. Tales sistemas se inspiran en las Redes Neuronales Biológicas (RNB o BNN por sus siglas en inglés de Biological Neural Network) pero, a diferencia de éstas, no reproducen los fenómenos químicos que se producen en las conexiones

entre neuronas, sino que toman de ellas sus singularidades como son el almacenamiento distribuido, el procesamiento paralelo y el aprendizaje adaptativo. Son, por lo tanto, sistemas de computación que modifican su comportamiento a partir de la experiencia y no a partir de una programación (González Arrieta, 2000).

Diferentes autores han tratado de definir una Red Neuronal Artificial. De entre todas ellas, caben destacar las siguientes:

- “Una Red de Neuronas Artificiales es un paradigma de procesamiento de información inicialmente inspirado en el modo en el que lo hace el cerebro” (Palma Méndez & Marín Morales, 2008)
- “Es un algoritmo matemático, implementable en la forma de una aplicación informática basado, o que trata de emular, el funcionamiento del cerebro humano”. (Corchado et al., 2000)

2.2. Red Neuronal Biológica vs Red Neuronal Artificial

Las BNN y las ANN presentan coincidencias y disparidades. En relación a las similitudes, el cerebro humano guarda la información en forma de patrones con diferentes niveles de complejidad, lo que nos permite reconocer esos mismos patrones desde ángulos de visión o puntos de vista diferentes, como es el caso del reconocimiento de rostros. Las ANN, de la misma forma, almacenan la información de forma distribuida dentro de su propia estructura, lo que les permite resolver problemas a través de mecanismos de procesamiento en paralelo, tratando de emular el procesamiento biológico (Corchado et al., 2000; González Arrieta, 2000). Otra similitud es la capacidad de adaptación de nuestros procesos cognitivos al medio que nos rodea, aprendiendo de nuestras experiencias. Las ANN también tienen la capacidad de poder adaptar su comportamiento y ello mediante un proceso denominado “entrenamiento de la red” (Corchado et al., 2000; González Arrieta, 2000; Ponce Cruz, 2011).

Tanto las BNN como las ANN parten de una unidad fundamental de procesamiento: *la neurona*. Ésta ha de interconectarse con otras muchas para el desempeño de su función conjunta. Y es en este punto donde las redes biológicas y las artificiales más diferencias presentan. Mientras que el cerebro humano tiene una estructura tridimensional en lo que a la interconexión de sus neuronas se refiere, las ANN se fundamentan en la operación de un reducido número de unidades de procesamiento, también llamadas “neuronas”, interconectadas entre sí, pero implementadas bajo la forma de código computable. En el caso de los sistemas artificiales, el número de

neuronas suele ser del orden de varias centenas o algún millar en el caso de sistemas más complejos, no disponiendo de una densidad de interconexión superior al millar. Por el contrario, el número de neuronas del cerebro humano ronda las 10^{11} neuronas por persona, pudiendo llegar a tener del orden de 10^5 interconexiones/neurona en las densamente interconectadas, lo que supone una media de unas 10.000 conexiones/neurona y una salida ramificada a varios cientos de neuronas (González Arrieta, 2000).

Por último, las redes biológicas son generadoras de procesos neurobiológicos en los que se establecen relaciones de complejidad muy alta y cuyo fundamento es químico-eléctrico, lo que no es representable por medio de dispositivos electrónicos programables. Al contrario, las ANN son aproximadores no lineales que simulan la forma de funcionamiento del cerebro humano (Ponce Cruz, 2011).

Las diferentes formas de establecer características y particularidades de las neuronas artificiales individuales, el número de ellas que participarán en el modelo, la forma de sus conexiones, su estructura y el procedimiento que permita la modificación de los parámetros significativos que habilitan el aprendizaje, serán condicionantes que delimiten y restrinjan tanto el tipo como el ámbito de actuación de las ANN, dando lugar a las distintas arquitecturas (Corchado et al., 2000; Isasi Viñuela & Galván León, 2003).

2.3. Conceptos básicos de Redes Neuronales Artificiales

Una Red Neuronal Artificial puede ser considerada como un conjunto de neuronas interconectadas, por medio de conexiones ponderadas y siguiendo una estructura de capas, cada una de las cuales tiene una importancia y significado diferentes para el funcionamiento de la red. La red dispondrá de un conjunto de neuronas por las que se introducirán los datos de entrada y un conjunto de neuronas por las que se obtendrán las salidas de la red, que será el resultado obtenido por el procesamiento interno de los datos de entrada. El conjunto de todo lo anterior conformará un "Sistema Neuronal Artificial". La salida de cada neurona, por lo general y salvo excepciones particulares, sirve como una de las múltiples entradas para otras neuronas con las que se interconecta (Imagen 2-1).

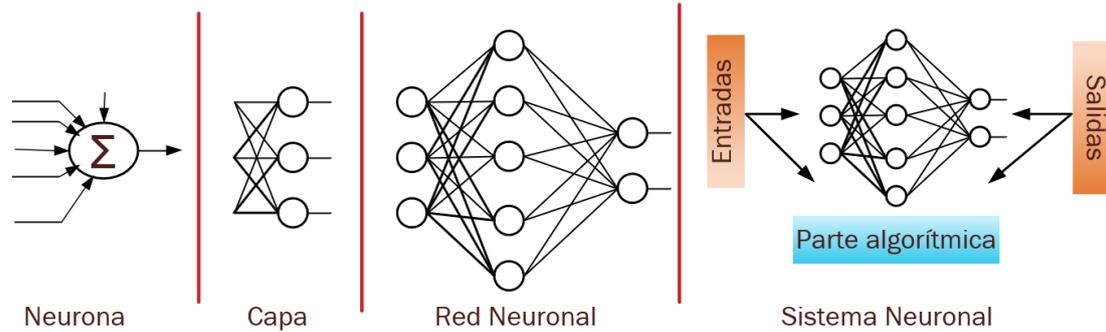


Imagen 2-1: Estructura jerárquica de un Sistema Neuronal Artificial

En su proceso de aprendizaje, la red modificará los pesos de las conexiones de forma automática siendo ésta la base de la adquisición del conocimiento. A la hora de clasificar una ANN, hay diferentes aspectos que condicionan el funcionamiento anterior y que definen el modelo, arquitectura o topología, de la ANN (Corchado et al., 2000; Martín del Brío & Sanz Molina, 2006; Pajares Martinsanz & Santos Peñas, 2005; Palma Méndez & Marín Morales, 2008; Ponce Cruz, 2011):

- Modelo de unidad de procesamiento o neurona elegido en función de la forma en la que procese la entrada para obtener su salida.
- Estado posible a la salida de cada neurona. Puede limitarse a los estados de activada/inhibida o pudieran considerarse salidas numéricas. En todo caso, siempre será el resultado del procesamiento de la información disponible en sus entradas.
- Forma en la que se modifican los estados de las neuronas de la red.
- Número de capas o niveles en los que se distribuirán las neuronas. Las neuronas se agrupan en unidades estructurales a las que denominaremos "capas". Las neuronas de una capa pueden agruparse, a su vez, formando grupos neuronales o "clusters". Todas las neuronas de una misma capa, de no existir clusters, suelen ser del mismo tipo. Como mínimo ha de haber dos: una capa de entrada para recoger los valores con los que se alimenta la red y una capa de salida que muestre el resultado obtenido por la misma. Habitualmente las neuronas de la capa de entrada se limitan a recoger los datos presentados a la red, sin que se produzca procesamiento alguno de la información. Por esta razón no se suele contabilizar como "capa", dejándose este concepto para aquellos niveles en los que sí se realiza procesamiento de los datos que se propagan. Suelen disponerse una o más capas intermedias formadas por neuronas que no suelen tener conexión con el exterior, razón por la que se les denomina "neuronas ocultas". Por extensión, a las capas que

las contienen también se les denomina con el nombre coloquial de “capas ocultas”. El conjunto de una o más capas constituye la red neuronal.

- Número de neuronas y su distribución en la red. Por lo general, el número de neuronas existente en las capas de entrada y salida está condicionado por el problema a resolver, dependiendo de la diversidad de los datos de entrada y de las posibles clases de salida (una única neurona para mostrar valores de predicción, una neurona para mostrar la pertenencia a una clase, etc).
- Importancia de las conexiones entre las neuronas. Las conexiones están ponderadas según sus “pesos sinápticos”. El conjunto de todos ellos representa una configuración de la misma. La modificación de los pesos, realizada por medio del proceso de entrenamiento, es lo que confiere a la red la capacidad de aprendizaje y adaptación al entorno de trabajo.
- Patrón de conectividad entre las neuronas. Al igual de lo que ocurre en sus homólogas biológicas, las conexiones sinápticas sólo propagan la información desde la neurona presináptica a la postsináptica. Las conexiones pueden ser de dos tipos:
 - Conexiones “Inter-capa”: aquellas que se dirigen hacia neuronas que se encuentran en la siguiente capa de la red o puedan ir hacia neuronas de capas precedentes. A este último tipo de conexiones también se le llama “realimentadas”.
 - Conexiones “Intra-capa”: aquellas que se dirigen hacia neuronas de la misma capa, en cuyo caso se denominan conexiones “laterales” e, incluso, pueden darse conexiones de una neurona consigo misma “auto realimentadas”.
- Regla de aprendizaje que permita la modificación automática de algunos de los ítems descritos en los puntos anteriores. Es habitual que los cambios no afecten a la arquitectura de la red (número de capas, número de neuronas en cada capa o patrón de conectividad) y sí a los pesos de las conexiones.
- Función de coste o pérdida, también llamada “loss function”, que permita determinar la bonanza del entrenamiento y posterior funcionamiento de la red. Como norma general, la función de coste está relacionada directamente con el error que se genera en la salida de la red.

2.3.1. La neurona artificial.

El modelo matemático de neurona artificial propuesto por McCulloch y Pitts en 1943 (Imagen 2-2) contempla que cada neurona recibe un conjunto de entradas $\{x_1, x_2,$

x_3, \dots, x_n ponderadas cada una de ellas por una serie de valores o "pesos sinápticos" $\{w_1, w_2, w_3, \dots, w_n\}$ y generando una única salida $\{y\}$. Siguiendo el modelo biológico neuronal del cerebro, las entradas simulan las conexiones interneuronales de nuestro sistema, pudiendo generar señales que fortalezcan o inhiban con diferente intensidad las conexiones con sus neuronas vecinas.

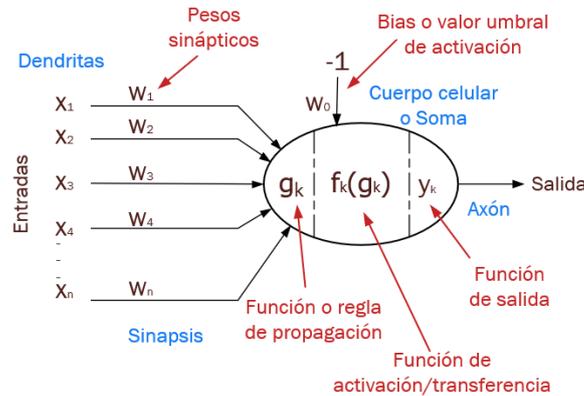


Imagen 2-2: Modelo neuronal de McCulloch-Pitts ampliado (neurona k)

El primer paso es obtener el valor g o "valor de propagación de la neurona", que determina la entrada total de la misma en función de sus n entradas. Como norma habitual, $g_{neurona k}$ es la suma ponderada de las entradas.

$$g_k = \sum_{i=1}^n w_i \cdot x_i \tag{2.1}$$

aunque no siempre es así. En ocasiones el valor de g es el resultado de una función algebraica que representa la distancia euclídea (2.2) pudiendo ser otras funciones métricas (distancia absoluta, de Voronoi, de Mahalanobis, de Manhattan...(Corchado et al., 2000; González Arrieta, 2000)):

$$g_k = \sqrt{\sum_{i=1}^n (w_i - x_i)^2} \tag{2.2}$$

En cualquier caso, dicha expresión se denomina "Función o Regla de Propagación".

Hay que destacar la entrada etiquetada como w_0 a la que se denomina "polarización" o "bia" (Corchado et al., 2000) y que hace las veces de "umbral de activación". Se le suele considerar como un peso más.

El signo de los pesos puede ser positivo (excitatorio) o negativo (inhibitorio). Según lo anterior, se puede redefinir la función de propagación de la neurona como sigue:

$$g_k = \sum_{i=0}^n w_i \cdot x_i \text{ donde } x_0 = -1 \tag{2.3}$$

En el siguiente paso, el valor de g para la neurona "k" se aplica a la "función de activación de la neurona" también llamada "función de transferencia". En realidad, se trata de dos funciones diferentes pero que van ligadas una a la otra, razón por la que frecuentemente son consideradas como una única función. La primera es la encargada de modificar el estado actual de la neurona, si procede, comparando el valor g y el establecido como umbral de activación para esa neurona. La segunda, generalmente no lineal para asimilar su respuesta a la de las neuronas biológicas, es la encargada de limitar el valor de salida a un rango de valores normalizado.

$$f_k(g_k) = f_k(\sum_{i=0}^n w_i \cdot x_i) \quad (2.4)$$

Por último, la salida de la neurona se obtiene aplicando el resultado anterior a la "función de salida". Habitualmente, esta función es lineal pura o "función de identidad", por lo que la salida de la neurona en un instante determinado, que define el nuevo estado de activación a partir de las entradas de neuronas precedentes en un instante anterior, es:

$$y(t+1) = f_k(g_k(t)) = f_k(\sum_{i=0}^n w_i \cdot x_i(t)) \quad (2.5)$$

Para hacer computable el proceso y mejorar la eficiencia a la hora de trabajar con bucles en un código informático, se requiere que las entradas y las salidas tengan la forma de vectores. Si denominamos W al vector que contiene los pesos y bias y X al vector de entradas, la expresión anterior quedaría, sin considerar el factor tiempo, como sigue:

$$y_k = f_k(g_k) = f_k(W^T \cdot X) \quad (2.6)$$

donde el vector de pesos ha sido traspuesto para que el producto de ambos vectores sea realizable.

Aunque el modelo de neurona artificial funcione en base a sumas ponderadas, hay que recordar que la neurona biológica emplea mecanismos dendríticos mucho más complejos que los vistos.

En la práctica, las funciones de activación y transferencia se consideran una y la función de salida de la neurona se obvia al tener el mismo valor que el cómputo de las dos funciones anteriores, por utilizarse habitualmente la función lineal de identidad. Por tanto, el dato característico de la neurona en la descripción de una ANN, será el de la función de transferencia implementada en la misma. El modelo de neurona que se considerará en adelante a lo largo de este documento (Imagen 2-3), es un modelo simplificado con respecto al mostrado en la Imagen 2-2. Esta neurona estará formada por:

- Las entradas, incluyendo las bias, ponderadas por pesos sinápticos conocidos para cada una de ellas.
- La función o regla de propagación de la que se obtendrá la entrada global de la neurona, la cual será el sumatorio ponderado de todas las entradas incluyendo bias.
- La función de transferencia que representará simultáneamente el estado de activación y la salida de la neurona.

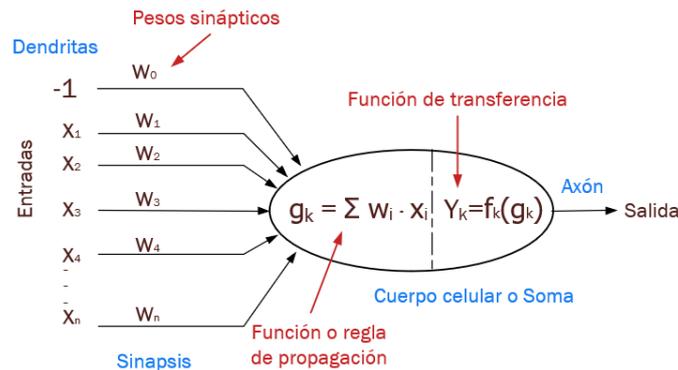


Imagen 2-3: Modelo neuronal simplificado (neurona k)

2.3.2. Funciones de transferencia

La función de transferencia calcula la respuesta de la neurona conforme al procesamiento de los datos de entrada, propagando la información desde la neurona actual hacia el resto de las neuronas con las que está conectada. Las funciones de transferencia más utilizadas son las que se describen a continuación.

- **Función Lineal Pura o Función Identidad:** La función devuelve el mismo valor que se le introduce. Es la función habitual para la función de salida de la neurona (Imagen 2-4a)
- **Función Lineal:** Esta función es una variante de la anterior que se emplea cuando se quiere acotar el resultado entre $[0,1]$, estableciendo otro valor (c en la expresión) como umbral. (Imagen 2-4b)
- **Función Lineal-Mixta:** Es una extensión de la anterior para acotar la salida entre los valores $[-1,1]$. También requiere un valor umbral (c en la expresión) (Imagen 2-4c). (Andrade Tepán, 2013).
- **Función Sigmoidea o Logaritmo Sigmoidal:** Acota los valores de la salida al rango $[0,1]$. Su forma depende del parámetro a (pendiente de la curva) (Imagen 2-4d).
- **Función Bipolar Sigmoidea:** Es la versión de la función anterior para aquellas situaciones en las que se requiere acotar los valores de salida al rango $[-1,1]$.

También como la anterior, su forma depende del valor de su pendiente (parámetro a). (Imagen 2-4e). Puede aparecer con diferentes expresiones que son idénticas:

$$\frac{1 - e^{-ag}}{1 + e^{-ag}} \equiv \frac{e^{ag} - 1}{e^{ag} + 1} \quad (2.7)$$

Nótese que hay una relación entre las funciones sigmoidea y bipolar sigmoidea. Si las denominamos como $f(x)$ y $g(x)$ respectivamente se puede decir que:

$$g(x) = 2 \cdot f(x) - 1 \quad (2.8)$$

por lo que elegir una u otra depende del rango deseado en la salida.

- **Función Tangente Hiperbólica Sigmoidea:** A veces confundida con la bipolar sigmoidea por el enorme parecido de sus respectivas representaciones. Sus valores se pueden aproximar en función del valor que se les dé a sus correspondientes pendientes (a). (Imagen 2-4f). También puede aparecer con diferentes expresiones que son idénticas:

$$\frac{e^{ag} - e^{-ag}}{e^{ag} + e^{-ag}} \equiv \frac{1 - e^{-2ag}}{1 + e^{-2ag}} \equiv \frac{e^{2ag} - 1}{e^{2ag} + 1} \equiv \frac{2}{1 + e^{-2ag}} - 1 \quad (2.9)$$

- **Función ReLu (REctified Linear Unit).** Esta función realiza una operación de "umbral no lineal" (no es lineal en todo el dominio), en la que cualquier valor de entrada inferior a cero se pone a cero. Es una de las funciones de transferencia de relativa nueva incorporación en el campo de las redes neuronales. (Imagen 2-4g).

Todas las funciones de transferencia anteriores son deterministas, es decir, su valor se corresponde con uno calculado que depende únicamente del valor de entrada. Sin embargo, hay redes neuronales en las que la activación, y por lo tanto el valor obtenido en la salida, se desea que sea estocástico, es decir, que tenga una componente probabilística. Tal es el caso de la red neuronal denominada "Máquina de Boltzmann". Matemáticamente se podría definir como (Corchado et al., 2000)

$$f(g) = \left\{ \begin{array}{ll} 1 & \text{con probabilidad } p(g) \\ -1 & \text{con probabilidad } 1 - p(g) \end{array} \right\} \quad (2.10)$$

en la que habitualmente se toma la función sigmoidea para la función de probabilidad:

$$p(g) = \frac{1}{1 + e^{-\frac{g}{T}}} \quad (2.11)$$

en la que el parámetro T expresa el nivel de incertidumbre sobre la activación de la neurona. Para valores de T próximos a 0, la función deja de ser estocástica y pasa a ser determinista, siguiendo la forma de la función lineal comentada anteriormente en

este mismo punto. No obstante, también se pueden encontrar las siguientes funciones:

- Función Gaussiana. Expresa la salida de la neurona en el espacio de las probabilidades según una curva de Gauss (Imagen 2-4h).
- Función Softmax. Es una generalización de la regresión logística que puede ser aplicada a datos continuos y que se emplea en las redes neuronales de clasificación categórica. Calcula la distribución de probabilidad de cada clase objetivo, sobre todas las clases objetivo posibles. (Imagen 2-4i). Esta función no se aplica sobre una neurona en particular, sino que se aplica de forma conjunta sobre todos los valores de activación de todas las neuronas de la misma capa. De esta forma, cada una de ellas mostrará a su salida un valor entre 0 y 1, que ha de ser interpretado como la probabilidad de que los datos de entrada pertenezcan a la clase representada por la neurona. La suma de todos los valores de las neuronas de la capa de salida, es la suma de todas las probabilidades y ha de ser necesariamente igual a 1. En la Imagen 2-4 se muestran los valores de entrada a la función (Imagen 2-4i superior) y las probabilidades para cada una de las clases (Imagen 2-4i inferior).

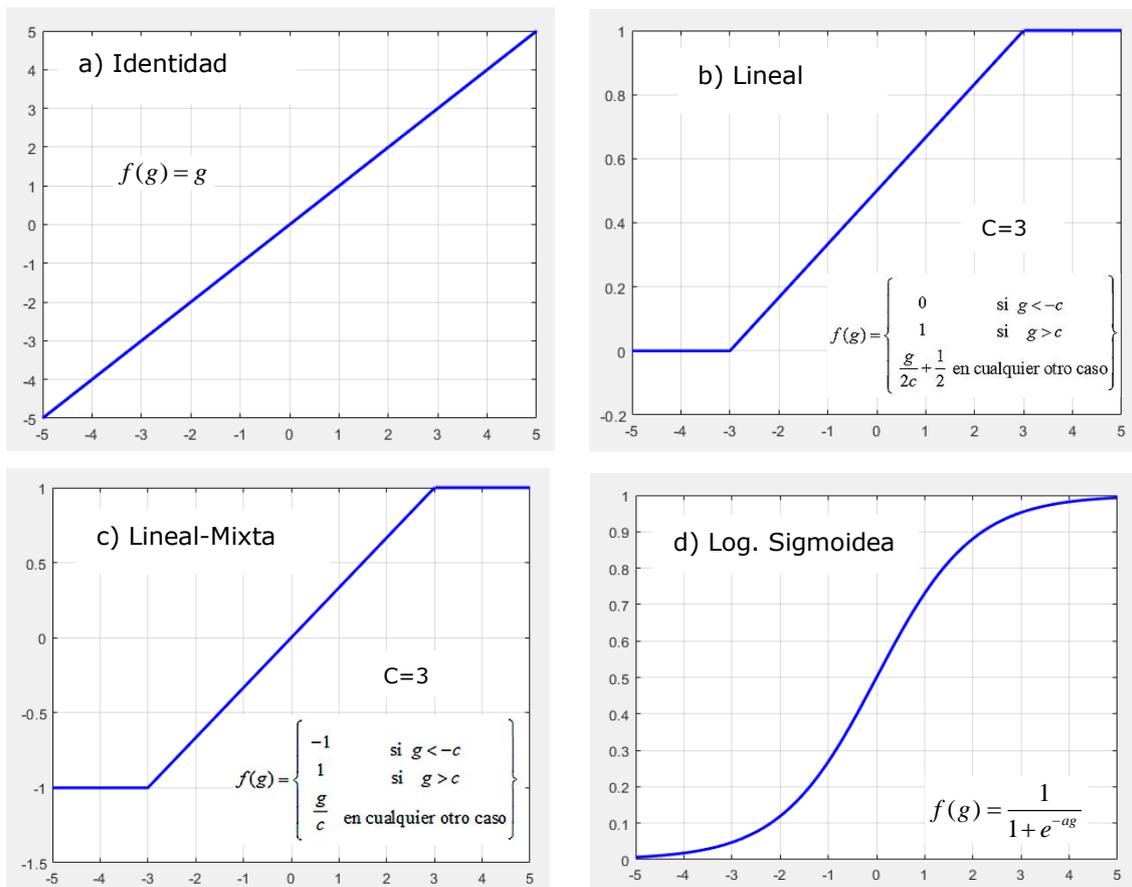
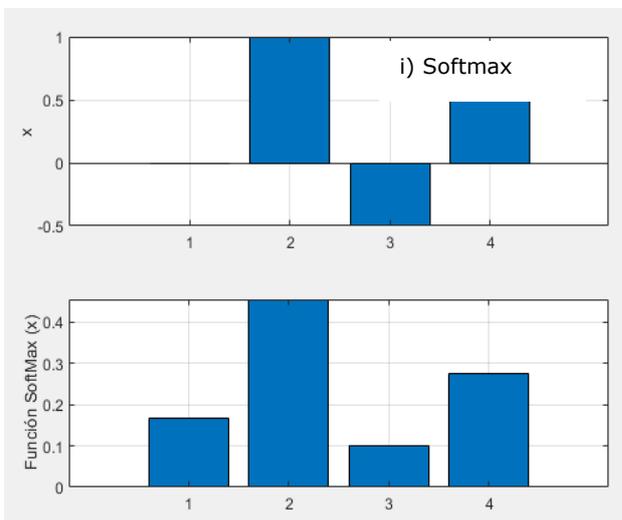
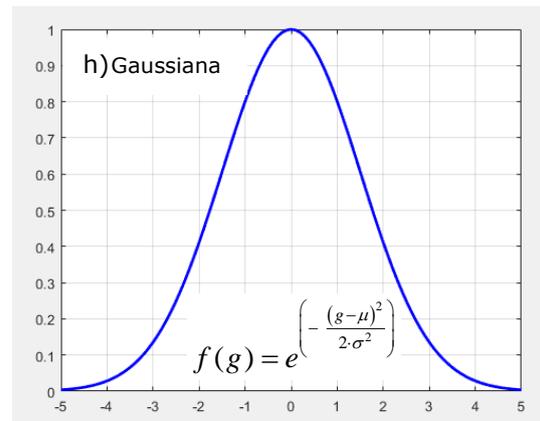
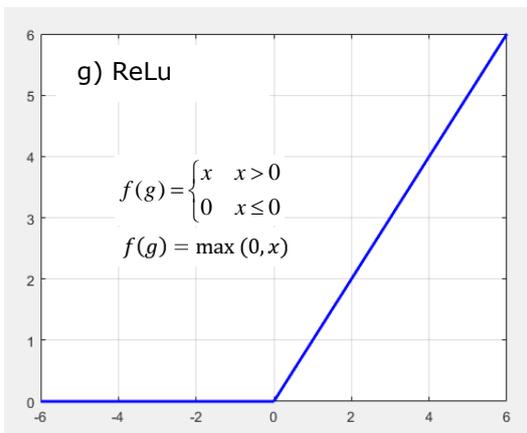
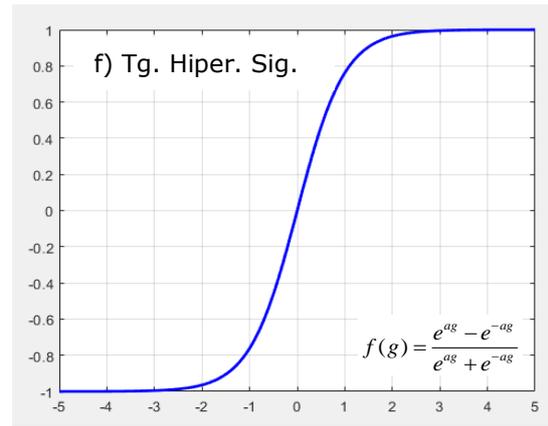
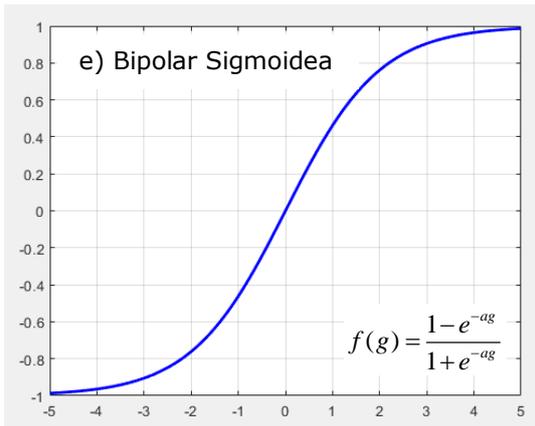


Imagen 2-4: Funciones de transferencia (Elaboración propia)
(Continúa)



$$\text{Softmax}(g)_i = \frac{e^{g_i}}{\sum_j e^{g_j}}$$

(En la función se obtiene el valor de la “i-ésima” salida de una capa en la que hay “j” neuronas).

Imagen 2-4: Funciones de transferencia (Elaboración propia)

2.4. Clasificación de las Redes Neuronales Artificiales

En función de los aspectos anteriormente explicados, las ANN pueden clasificarse conforme a todos estos criterios básicos (González Arrieta, 2000; Hilera González & Martínez Hernando, 1995; López Sánchez et al., 2007). Un detalle pormenorizado de cada uno de ellos se desarrolla en los siguientes subapartados:

2.4.1. Clasificación según la naturaleza de los datos de entrada y de salida.

Según este criterio las ANN pueden ser clasificadas como:

Analógicas o continuas. Los datos de entrada y de salida son valores reales continuos que representan una naturaleza analógica. Suelen ser utilizadas para la resolución de problemas de predicción.

Binarias. Los datos de entrada suelen ser de tipo analógico mientras que las neuronas de la capa de salida presentan únicamente dos estados: excitación o inhibición. Este tipo de redes suele ser utilizada en la resolución de problemas de clustering y categorización, donde hay una neurona de salida por cada categoría posible y su excitación marca la clase a la que se asignan los datos de la entrada.

2.4.2. Clasificación según el tipo, grado o patrón de conectividad.

Se refiere a la disposición y sentido de propagación de la información que se procesa. Una misma red puede compartir más de un tipo de conexiones. Según este criterio podemos distinguir los siguientes tipos de redes (Imagen 2-5):

Redes con conexión hacia adelante o Feedforward Networks. Con carácter general, todas las neuronas de una capa reciben señales procedentes de las neuronas de la capa inmediata anterior y las envían a las neuronas de la capa inmediata siguiente, siempre en el sentido de propagación de la información desde la entrada y hacia la salida de la red. Según este criterio, ninguna salida es entrada para neuronas del mismo nivel o de niveles precedentes de la red.

Redes con conexión hacia atrás o Feedback Networks. Son redes en las que algunas de sus neuronas conectan su salida a la entrada de neuronas de niveles previos. Se dice que son conexiones "realimentadas".

Conexiones recurrentes o Recurrent Networks. Son redes en las que algunas neuronas presentan una conexión consigo mismas o "auto-realimentación". Estas conexiones auto-recurrentes establecen bucles o caminos cerrados dentro de la propia red.

Conexiones laterales. Son redes en las que algunas de sus neuronas presentan conexiones con otras de la misma capa. Este tipo de conexiones son clásicas en redes en las que las neuronas "compiten" por ser la "neurona ganadora".

2.4.3. Clasificación según la topología de la red.

Según este criterio, las ANN se clasifican conforme al número de capas o niveles de neuronas (Imagen 2-5). Por ello, se pueden clasificar como:

Redes Monocapa: También denominadas como *Single Layer*. Son aquellas que cuentan con una única capa de neuronas, que es la capa de entrada y de salida de los datos que la red ha de procesar. Suelen presentar conexiones laterales y auto-recurrentes.

Redes Multicapa: en esta categoría se engloban las redes *Multi Layer Feedforward Networks*, *Multi Layer Feedback Networks* y *Multi Layer Feedforward/Feedback Networks* ya mencionadas.

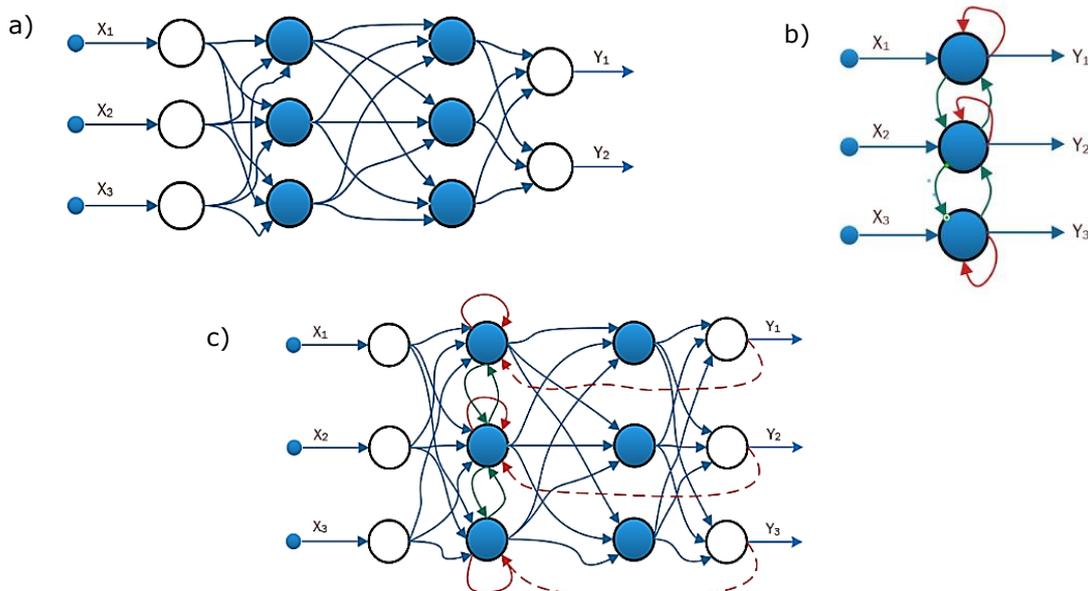


Imagen 2-5: a) ANN de tipo Multi Layer Feedforward convencional.
 b) ANN de tipo Single Layer con conexiones laterales, recurrentes y auto-recurrentes
 c) ANN de tipo Multi Layer Feedforward / Feedback Network con conexiones laterales, recurrentes y auto-recurrentes

Las redes de tipo Multi Layer Feedforward Networks son las más comunes y las empleadas en los artículos objeto de esta tesis. Disponen de neuronas jerarquizadas en niveles o capas las cuales podemos clasificar en "capa de entrada", "capa de salida" y una o más capas de neuronas intermedias o "capas ocultas" que es en las que realmente se procesa la información. Las redes multicapa se referencian por el número de neuronas de cada capa (Imagen 2-6)

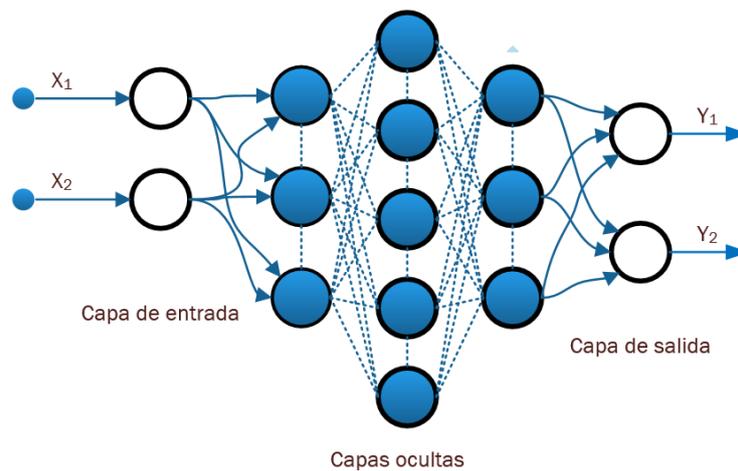


Imagen 2-6: ANN de tipo Multi Layer Feedforward 2-3-5-3-2

2.4.4. Clasificación según el tipo de asociación entre datos de entrada y de salida.

Como se ha comentado anteriormente, las redes neuronales almacenan el conocimiento de forma distribuida y bajo la forma de pesos asignados a todas y cada una de las conexiones existentes entre sus neuronas. Según este criterio, las ANN se pueden clasificar en:

Redes heteroasociativas: Las redes de este tipo aprenden pares de conjuntos de datos de entrada y salida. Así, cuando a la red se le presenta un conjunto de datos, en su salida aparece el conjunto de datos asociado. Estas redes han de disponer de al menos dos capas, al tener que retener los datos de entrada y los de salida de forma separada, a efectos de su consulta por parte del algoritmo de entrenamiento.

Redes autoasociativas: La red aprende colecciones de datos que deben ser mostrados como salidas de forma que, cuando se le presenta un conjunto diferente de datos a la entrada de la red, ésta responde con la salida más parecida después de un proceso de correlación. Se utilizan para el filtrado de datos, la reconstrucción de información incompleta o con ruido, la exploración de

relaciones entre datos similares que facilite la búsqueda por contenido en grandes repositorios, etc. Suelen ser redes que disponen de una única capa de neuronas, siendo ésta la capa de entrada y de salida de forma simultánea.

2.4.5. Clasificación según la dinámica de actualización del estado de las neuronas

Según este criterio, el cambio de estado de las neuronas se puede realizar de las siguientes formas diferentes:

Redes síncronas: la actualización de las neuronas se realiza por capas y en la dirección del flujo de datos de entrada-salida, de forma síncrona y siguiendo los pulsos de un reloj común a todas las neuronas. Todas las neuronas de una misma capa se actualizan a la vez.

Redes asíncronas: cada neurona se actualiza de forma independiente. Suele acompañarse del criterio estocástico.

Redes estocásticas: el instante en el que se produce la actualización y el valor que toma finalmente cada neurona, responden a una función aleatoria. Sólo una de las neuronas cambia de estado en cada instante.

2.4.6. Clasificación según el algoritmo de aprendizaje o entrenamiento utilizado.

En las ANN se distinguen dos modos de operación: modo de recuerdo, implementación o ejecución, en el que la red realiza el trabajo para el que ha sido desarrollada, y el modo de aprendizaje o de entrenamiento durante el que se modelan las sinapsis. Este último proceso consiste en la modificación de los pesos asignados a las mismas según una regla de aprendizaje, buscando la optimización de una función de coste que evalúa el error cometido por la red durante el entrenamiento. Así y de forma iterativa, se van modificando los pesos de las conexiones sinápticas hasta considerar que el proceso de aprendizaje ha terminado.

Hay diferentes criterios para la clasificación de los algoritmos de entrenamiento:

En función del problema a resolver:

- **Clasificación:** Pueden ser algoritmos de clasificación binaria como SI / NO cumple una condición o de clasificación multi-clase, asignando los datos de entrada a alguna de las categorías posibles preestablecidas.
- **Regresión:** Para predecir valores o aproximarse a la predicción de valores según los datos de entrada.
- **Reducción de la dimensionalidad:** Para reducir el número de características que mejor representan a las muestras de una población, obteniéndose nuevas características, menores en número, que son combinaciones de las iniciales.
- **Clustering:** Para realizar agrupaciones en conjuntos de muestras según similitudes desconocidas y que son encontradas por la propia red.

En función del uso de parámetros:

- **Algoritmos PARAMÉTRICOS:** Los datos de entrenamiento son un conjunto de parámetros de tamaño fijo, que se mantiene a lo largo de todo el entrenamiento. El número de ellos es independiente del número de muestras de entrenamiento del que se dispone o del número de datos de entrada de la red.
- **Algoritmos NO PARAMÉTRICOS:** Los parámetros que es necesario almacenar de la red dependen directamente del tamaño muestral de los datos de entrenamiento y del orden de magnitud de los datos de entrada.

En función del momento del entrenamiento

- **Redes con aprendizaje "on-line":** El proceso de entrenamiento se produce de forma paralela al de ejecución de la red en explotación. Conlleva la variación dinámica de los pesos cada vez que se produce una nueva entrada a la red.
- **Redes con aprendizaje "off line":** El proceso de entrenamiento se ha de realizar en una fase previa a la de explotación de la red. Conlleva la existencia de un conjunto de datos de entrenamiento y un conjunto de datos de test o prueba. Al contrario de lo que ocurre en el modelo anterior, los pesos de las conexiones no varían después de terminar la fase de entrenamiento.

Existencia de un agente externo supervisor que controle el proceso:

- **Redes con aprendizaje supervisado** (Imagen 2-7): En el entrenamiento se utilizan pares de datos con los datos de entrada y sus correspondientes salidas conocidas. Para medir la capacidad de generalización de la red y por tanto la bonanza de su funcionamiento, se ha de utilizar un set de datos de test que no haya participado en el entrenamiento.

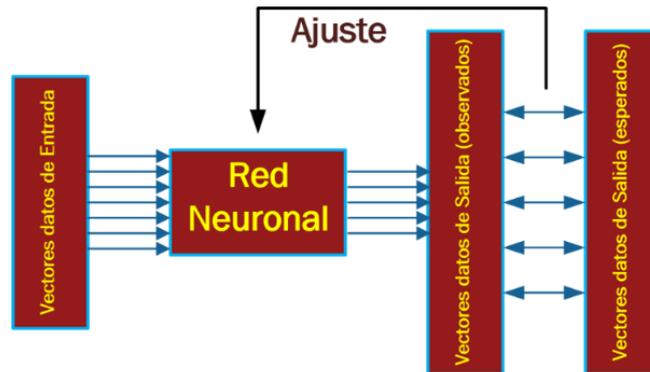


Imagen 2-7: Proceso de entrenamiento supervisado de una ANN
(Elaboración propia a partir de (Isasi Viñuela & Galván León, 2003))

Este tipo de aprendizaje puede estar regulado de dos formas diferentes que siguen un esquema común:

- **Aprendizaje por corrección de error.** Durante la fase de entrenamiento los pesos de las conexiones se van ajustando, de forma iterativa, en función de la diferencia entre los valores observados y los esperados a la salida de la red. Algoritmos o reglas que utilizan este tipo de aprendizaje son:
 - La regla de aprendizaje de la red Perceptrón
 - Regla Delta o del mínimo error cuadrado utilizada en las redes Adaline y Madaline
 - Regla Delta Generalizada utilizada en redes multicapa.
- **Aprendizaje estocástico.** Consiste en cambiar los valores de los pesos de forma aleatoria y analizar el efecto producido en relación con el deseado, y ello en función de distribuciones de probabilidad conocidas.
- **Redes con aprendizaje no supervisado o auto-organizado** (Imagen 2-8): En el entrenamiento no se utilizan las salidas porque son siempre desconocidas en este tipo de entrenamiento. Por tanto, no puede existir ningún mecanismo que indique si la salida es la esperada, ni una

retropropagación de un error que no se puede calcular. Las redes con este tipo de aprendizaje son capaces de autoorganizarse, de encontrar las similitudes, características, correlaciones o categorías establecidas entre los datos de entrada, modificando su estructura. Esta autoorganización se realiza por capas o por grupos reducidos de neuronas con un cierto grado de vecindad, asemejándose a las biológicas en cuanto a que, al igual que éstas, se especializan por regiones de la red. Según este modelo, cada grupo de neuronas de la capa de salida responde de forma similar ante los mismos patrones de datos presentados a la entrada, por lo que patrones de entrada próximos entre sí, activan neuronas de salida vecinas.

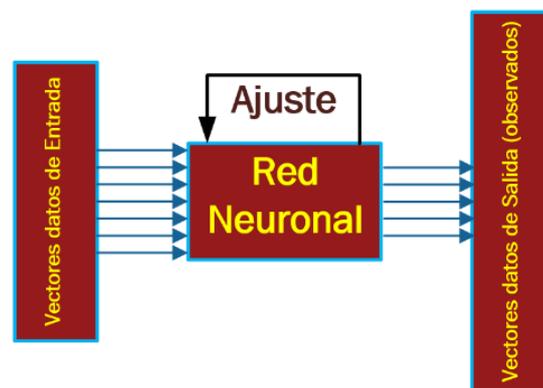


Imagen 2-8: Proceso de entrenamiento no supervisado de una ANN
(Elaboración propia a partir de (Isasi Viñuela & Galván León, 2003))

Según lo anterior, las ANN que utilizan un algoritmo de entrenamiento no supervisado se pueden clasificar en:

- **Aprendizaje hebbiano:** Basado en el postulado por Donald O. Hebb en 1949. Este tipo de aprendizaje trata de determinar el grado de familiaridad de los datos de entrada o reconocer los patrones que en ellos pudiera haber. Los pesos de las conexiones se ajustan en función de las correlaciones encontradas activando las salidas de las dos únicas neuronas. Si se produjese la activación de ambas neuronas, se refuerza la conexión entre las neuronas. Si por el contrario se activa únicamente una de ellas, la conexión se debilita. Por tanto, la modificación de los pesos es función de los estados de activación de las neuronas de salida después de haberse propagado los datos de entrada y sin considerarse el estado de activación deseado. En la fase de explotación, estas redes son capaces de recomponer el patrón aprendido a partir de datos de entrada incompletos, distorsionados o con mucho ruido o de predecir valores de series temporales, a partir de datos de

observaciones consecutivas. Las redes más representativas de este tipo son las de Hopfield y las Additive Grossberg.

- **Aprendizaje competitivo y cooperativo:** Cuando en la red se introduce un conjunto de datos de entrenamiento, las neuronas de la capa de salida compiten entre sí hasta que una sola de ellas, o un grupo muy reducido, se activen o "ganen". Todas las neuronas de la red presentan conexiones con otras neuronas que no han de ser necesariamente de la misma capa. Estas conexiones pueden ser recurrentes de autoexcitación (aprendizaje cooperativo) o conexiones de inhibición entre neuronas vecinas (aprendizaje competitivo). Con este aprendizaje se busca "categorizar" los datos de entrada de la red, asignando a la misma neurona de salida (representativa de una de las clases predefinidas) aquellos datos que presenten un alto grado de similitud o presenten algún tipo de relación entre sí. La variación del peso de una conexión "i-j", entre dos neuronas, será nula si la neurona "j" no recibe una señal de excitación por parte de la neurona "i", modificándose en el caso contrario. Por tanto y durante el proceso de aprendizaje, sólo se modifican los pesos correspondientes a las neuronas que resultan ser ganadoras en cada paso de entrenamiento. Al finalizar el mismo, los pesos de las conexiones de neuronas vecinas estarán reforzados frente a las conexiones de neuronas no afines, las cuales tendrán pesos que se habrán visto reducidos. Las redes más significativas de este tipo son la de Kohonen, conocidas como Self Organizing Maps (SOM) y las redes Learning Vector Quantization (LVQ)

- **Redes con aprendizaje híbrido.** En ellas coexisten los dos tipos de aprendizaje anteriores, los cuales son aplicados sobre capas de neuronas diferentes.
- **Redes con aprendizaje reforzado o aprendizaje por refuerzo.** También denominado como "Reinforcement learning". Este tipo de aprendizaje es más lento que el anterior y se encuentra entre el supervisado y el autoorganizado existiendo variantes para ambos. Con el aprendizaje supervisado comparte la existencia de un índice de error, ahora global y no local, que muestra la bonanza del funcionamiento de la red. Con el aprendizaje autoorganizado comparte el hecho de desconocerse información sobre la salida.

2.5. La red neuronal Perceptron Multicapa (MLP)

En los siguientes puntos se detalla el funcionamiento y el entrenamiento de este tipo de red, por ser el utilizado en los tres artículos compendiados en la presente tesis doctoral.

El Perceptron Multicapa (MLP de Multi Layer Perceptron) es una de las arquitecturas de red neuronal artificial más conocida y empleada, siendo la más representativa de las clasificadas como FeedForward o con conexiones hacia adelante. Esta red está constituida por las capas de neuronas de entrada y salida y de al menos una capa de neuronas oculta. Las neuronas de la capa de entrada no realizan ninguna labor como tales, limitándose a recibir los datos o patrones de entrada y a propagarlos hasta todas y cada una de las neuronas de la primera de las capas ocultas. Su número depende del problema a resolver, siendo habitual disponer de una neurona en la capa de entrada por cada variable diferente que se ha de procesar. Las neuronas de la capa de salida permiten extraer la salida de la red hacia el exterior y su número también depende del problema a resolver, siendo su función de transferencia habitual la función identidad.

Por su parte, las neuronas de las capas ocultas realizan un procesamiento no lineal de los datos que propagan, empleando funciones de transferencia como la función sigmoidea o la tangente hiperbólica sigmoidea. Tanto el número de capas ocultas como el número de neuronas de cada una de ellas ha de ser elegido por el diseñador de la red. Todas las conexiones son hacia adelante (FeedForward) y todas las neuronas de una capa están conectadas con todas las neuronas de la capa siguiente (red con conectividad total o totalmente conectada). Esto no impide que pudiera existir alguna conexión cuyo peso fuese igual a 0, lo que funcionalmente sería interpretado como la ausencia de dicha conexión. La gran mayoría de los sistemas implementados optimizan estos valores por ensayo error, modificando el número de capas y de neuronas de una red con una arquitectura determinada y entrenada, y comprobando si su eficiencia mejora. La optimización termina cuando se encuentra una solución que resuelve el problema razonablemente bien, aun teniendo la certeza de que pudieran existir otras mejores. Esto da lugar a la existencia de diferentes arquitecturas capaces de solventar el mismo problema, por lo que se suele optar por aquella que dispone de un menor número de neuronas, puesto que un número de neuronas elevado puede reducir la capacidad de generalización de la red.

El MLP surge para tratar de resolver los problemas planteados por Marvin Minsky y Seymour Papert en 1969, quienes demostraron las limitaciones teóricas del Perceptron y su regla de aprendizaje, así como las de los modelos matemáticos

neuronales artificiales de la época. Según sus estudios, la incorporación de capas de neuronas ocultas en el modelo de red Perceptron, permitiría resolver la deficiencia de estos modelos que no incorporaban herramientas que permitiesen la resolución de problemas marcadamente no lineales. Las reglas de aprendizaje utilizadas hasta entonces no contemplaban la existencia de capas de neuronas ocultas.

En el año 1985, diversos autores formulan la variante de la regla Delta, utilizada hasta entonces en las redes Adaline y Madaline, denominada "**Regla Delta Generalizada**", aplicable a redes neuronales con funciones de transferencia no lineales y con capas de neuronas ocultas. Esta regla es la base del desarrollo del algoritmo de aprendizaje supervisado **Backpropagation** (BP) (Rumelhart et al., 1986) el cual aporta una solución para la construcción de ANN complejas.

2.5.1. El algoritmo Backpropagation (BP).

Este algoritmo de entrenamiento, o regla de aprendizaje, se enmarca dentro de los denominados de aprendizaje supervisado, por lo que el entrenamiento se realiza con N patrones de entrada y sus correspondientes salidas conocidas (x_i, y_i) . En la imagen 2-9 se muestra la notación empleada para la explicación del desarrollo matemático de este algoritmo.

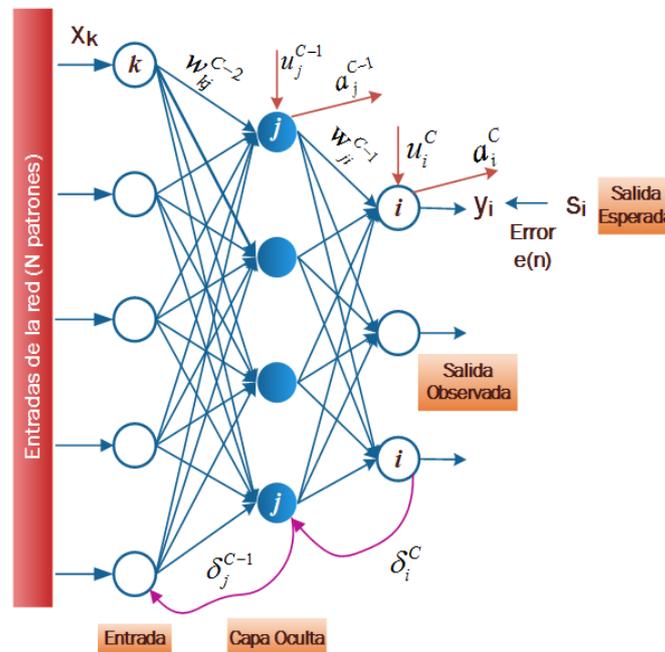


Imagen 2-9: Nomenclatura del Algoritmo BP
(Elaboración propia a partir de (Flórez López & Fernández Fernández, 2008))

El objetivo perseguido por el algoritmo BP, es la determinación de los pesos de las conexiones entre las neuronas de una ANN, que permitan aproximar las salidas

observadas a las deseadas. Para ello, el proceso de aprendizaje de la red se formulará como un problema de minimización del error que se produce entre dichas salidas, que puede expresarse de la siguiente forma (Flórez López & Fernández Fernández, 2008).

$$\text{Min}_W E = \text{min}_W \sum_{i=1}^N e(W, x_i, y_i) \quad (2.12)$$

siendo W el conjunto de pesos y bias que definen la red y E la función de coste o de error que cuantifica la media de los errores generados en cada iteración, como diferencia global entre las salidas observadas y deseadas:

$$E = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e(n) \quad (2.13)$$

expresión en la que N es el número de patrones de entrenamiento y $e(n)$ el error cometido en la salida para el patrón de entrada "n":

$$e(n) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_c} (s_i(n) - y_i(n))^2 \quad (2.14)$$

En las que n_c es el número de neuronas de la capa en estudio, $s_i(n)$ cada una de las i salidas deseadas para el patrón de entrada n e $y_i(n)$ cada una de las i salidas observadas para ese mismo patrón. El problema se reduce "simplemente", a la búsqueda de un mínimo global en la función de error E . Como las funciones de transferencia implementadas en las neuronas de la red MLP son "no lineales", las respuestas de las neuronas también lo son respecto de los parámetros de la red, haciendo que la minimización de la función de error sea un problema no lineal que requiere técnicas no lineales de optimización. De entre las herramientas y recursos matemáticos posibles, uno de los más utilizados es el del "Descenso del Gradiente" de la propia función de error, lo que hace que las variaciones del error sigan la dirección en la que esta función decrece paulatinamente. Aunque últimamente se han desarrollado otras técnicas para localizar el mínimo global de la función, como son las técnicas basadas en búsquedas aleatorias o las técnicas evolutivas, es la del descenso del gradiente la empleada en las redes objeto de esta tesis.

Aunque se ha mencionado que el entrenamiento de la red trata de minimizar el error global (2.12), el procedimiento se fundamenta en la corrección del error para cada patrón de entrenamiento (2.14). En general, el resultado es diferente según se realice la búsqueda del mínimo considerando sólo los errores individuales o considerando el error promedio del sistema. Una verdadera búsqueda por gradiente del error mínimo del sistema, debería basarse en la minimización del error promedio del mismo.

La aplicación del descenso del gradiente sobre la función de error para cada patrón de entrenamiento $e(n)$, con respecto a los parámetros de la red $w(n)$, provoca que la modificación conjunta de dichos parámetros tenga en cuenta el patrón de entrada n y el patrón inmediatamente anterior $n-1$. Así, la modificación de los pesos conforme a la ley de aprendizaje se puede expresar de la siguiente manera:

$$w(n) = w(n-1) - \alpha \frac{\partial e(n)}{\partial w} \quad (2.15)$$

En la expresión anterior, α es la tasa o razón de aprendizaje, que define la pendiente del gradiente o velocidad de variación de los parámetros de la red. También y en este caso, es habitual que su valor cumpla ($0 < \alpha \leq 1$) (Flórez López & Fernández Fernández, 2008).

Como las redes MLP disponen de una arquitectura basada en la distribución de neuronas en capas sucesivas, la aplicación del algoritmo descrito implica la propagación del error cometido por las neuronas de salida, hacia las salidas de las neuronas de las capas precedentes. Esta "propagación del error hacia atrás" o "retropropagación del error", es la que le da el nombre a este algoritmo de entrenamiento y trata de determinar el grado de participación de cada peso y bia de cada neurona, en el error global cometido por la red.

En la red MLP el algoritmo se diferencia en función de si (a) lleva a cabo una modificación de los bias de las neuronas de la capa de salida y de los pesos de sus conexiones con las neuronas de la capa inmediata anterior o bien (b) lleva a cabo una modificación de los bias y pesos de las conexiones del resto de las neuronas de la red.

a) Actualización de los bias de las neuronas de la capa de salida y los pesos de sus conexiones con las neuronas de la capa anterior.

Consideremos a $w_{ji}^{C-1}(n)$ el peso de la conexión entre la neurona j de la última capa oculta de la red (*capa C-1*) con la neurona i de la capa de salida (*capa C*) para el patrón de entrada n -ésimo. La aplicación de (2.15) quedaría

$$w_{ji}^{C-1}(n) = w_{ji}^{C-1}(n-1) - \alpha \frac{\partial e(n)}{\partial w_{ji}^{C-1}} \quad (2.16)$$

Aplicando la regla de la cadena para el gradiente del error $e(n)$ obtendremos

$$\frac{\partial e(n)}{\partial w_{ji}^{C-1}} = \frac{\partial e(n)}{\partial y_i(n)} \cdot \frac{\partial y_i(n)}{\partial w_{ji}^{C-1}} \quad (2.17)$$

Considerando que en (2.14) las salidas deseadas $s_i(n)$ son constantes que no dependen de los pesos y que el peso $w_{ji}^{C-1}(n)$ solo afecta a la salida observada $y_i(n)$, la ecuación del cálculo de la derivada de la salida de una neurona, respecto de los pesos de las conexiones que la unen a las neuronas de la capa precedente, quedaría como se ve en la ecuación 2.18.

$$\frac{\partial e(n)}{\partial w_{ji}^{C-1}} = -(s_i(n) - y_i(n)) \cdot \frac{\partial y_i(n)}{\partial w_{ji}^{C-1}} \quad (2.18)$$

La activación de una neurona depende de la función de propagación que depende de la suma ponderada de los pesos de las conexiones por las salidas de las células de la capa anterior con las que está conectada, más el umbral de la propia célula:

$$y_i = a_i^C = f\left(\sum_{j=1}^{n_{C-1}} w_{ji}^{C-1} \cdot a_j^{C-1} + u_i^C\right) \text{ para } i = 1, 2, \dots, n_C \quad (2.19)$$

De los términos del sumatorio, cada sumando depende de un peso diferente por lo que la derivada del sumatorio respecto de uno de los pesos, es 0 para todos los sumandos menos para uno. Así, la derivada del sumatorio respecto al peso w_{ji}^{C-1} es 0 para todos los sumandos menos para el producto $w_{ji}^{C-1} \cdot a_j^{C-1}$. Por ello, se puede decir que:

$$\frac{\partial y_i(n)}{\partial w_{ji}^{C-1}} = f'\left(\sum_{j=1}^{n_{C-1}} w_{ji}^{C-1} \cdot a_j^{C-1} + u_i^C\right) \cdot a_j^{C-1}(n) \quad (2.20)$$

Si definimos el término $\delta_i^C(n)$ correspondiente a la neurona i de la capa C y para el patrón de entrada n según la expresión

$$\delta_i^C(n) = -(s_i(n) - y_i(n)) \cdot f'\left(\sum_{j=1}^{n_{C-1}} w_{ji}^{C-1} \cdot a_j^{C-1} + u_i^C\right) \quad (2.21)$$

y reemplazando en (2.18) las expresiones obtenidas en (2.20) y (2.21) tendremos

$$\frac{\partial e(n)}{\partial w_{ji}^{C-1}} = \delta_i^C(n) \cdot a_j^{C-1}(n) \quad (2.22)$$

que aplicada sobre la expresión (2.16) resulta

$$w_{ji}^{C-1}(n) = w_{ji}^{C-1}(n-1) + \alpha \cdot \delta_i^C(n) \cdot a_j^{C-1}(n) \quad (2.23)$$

En la que $j=1, 2, \dots, n_{C-1}$ e $i=1, 2, \dots, n_C$. Esta expresión indica la forma en la que han de variar los pesos de las conexiones entre la penúltima y última capas de la red MLP.

Puede observarse que la variación sólo depende del valor de la salida de la neurona antecesora (a_j^{C-1}) y del error cometido por la neurona de salida ($\delta_i^C(n)$).

La variación de los bias de las neuronas de la capa de salida ($u_i^C(n)$), puede calcularse extrapolando las expresiones anteriores, teniendo en cuenta que es práctica habitual el considerarlos como una conexión más con una entrada fija e igual a 1. Por tanto, se puede decir que:

$$u_i^C(n) = u_i^C(n-1) + \alpha \cdot \delta_i^C(n) \quad (2.24)$$

Ya que $a_j^{C-1}=1$ y para $i=1,2,\dots,n_C$.

b) Actualización de los bias de las neuronas de una capa oculta y de los pesos de sus conexiones con las neuronas de la capa anterior

Consideraremos las conexiones entre las neuronas de las capas $C-2$ y $C-1$ de la red, siendo w_{kj}^{C-2} el peso de la conexión existente entre la neurona k de la capa $C-2$ y la neurona j de la capa $C-1$. Para el caso de una red con una única capa oculta, la capa de entrada estaría representada por $C-2$ (Imagen 2-9).

Aplicando la expresión (2.16) a este caso particular, tendríamos que:

$$w_{kj}^{C-2}(n) = w_{kj}^{C-2}(n-1) + \alpha \frac{\partial e(n)}{\partial w_{kj}^{C-2}} \quad (2.25)$$

Mientras que en (2.16) el peso w_{ji}^{C-1} sólo influía en la neurona de la capa de salida, el peso w_{kj}^{C-2} influye en todas las neuronas conectadas con la neurona j . Ello hace que la expresión de la derivada del error respecto del peso (2.14) ahora dependa de las derivadas para cada neurona de salida de la red. Por tanto, la expresión (2.18) ahora quedaría como:

$$\frac{\partial e(n)}{\partial w_{kj}^{C-2}} = - \sum_{i=1}^{n_C} (s_i(n) - y_i(n)) \cdot \frac{\partial y_i(n)}{\partial w_{kj}^{C-2}} \quad (2.26)$$

El cálculo de la derivada de la salida $y_i(n)$ respecto del peso w_{kj}^{C-2} , ha de contemplar que este peso influye en la salida a_j^{C-1} (neurona j de la capa $C-1$) que es la única neurona dependiente de este peso. Considerando lo anterior y aplicando la expresión (2.19) tendremos:

$$\frac{\partial y_i(n)}{\partial w_{kj}^{C-2}} = f' \left(\sum_{j=1}^{n_{C-1}} w_{ji}^{C-1} \cdot a_j^{C-1} + u_i^C \right) \cdot w_{ji}^{C-1} \cdot \frac{\partial a_j^{C-1}}{\partial w_{kj}^{C-2}} \quad (2.27)$$

Si sustituimos lo anterior en (2.21) y teniendo en cuenta la equivalencia de δ establecida en (2.26) se puede expresar que:

$$\frac{\partial e(n)}{\partial w_{kj}^{C-2}} = \sum_{i=1}^{n_c} \delta_i^C(n) \cdot w_{ji}^{C-1} \cdot \frac{\partial a_j^{C-1}}{\partial w_{kj}^{C-2}} \quad (2.28)$$

En la expresión anterior se desconoce el último término, que es el valor de la salida de la neurona j de la capa $C-1$ respecto del peso de la conexión que la une con la neurona k de la capa anterior $C-2$ ($\frac{\partial a_j^{C-1}}{\partial w_{kj}^{C-2}}$). Para ello aplicamos la expresión (2.19)

$$\frac{\partial a_j^{C-1}}{\partial w_{kj}^{C-2}} = f'(\sum_{k=1}^{n_{C-2}} w_{kj}^{C-2} \cdot a_k^{C-2} + u_j^{C-1}) \cdot a_k^{C-2}(n) \quad (2.29)$$

Si nuevamente definimos el término δ correspondiente a la neurona j de la capa $C-1$ y para el patrón de entrada n como $\delta_j^{C-1}(n)$, mediante la expresión

$$\delta_j^{C-1}(n) = f'(\sum_{k=1}^{n_{C-2}} w_{kj}^{C-2} \cdot a_k^{C-2} + u_j^{C-1}) \cdot \sum_{i=1}^{n_c} \delta_i^C(n) \cdot w_{ji}^{C-1} \quad (2.30)$$

Podemos simplificar (2.28) con (2.29) y (2.30) obteniéndose la expresión:

$$\frac{\partial e(n)}{\partial w_{kj}^{C-2}} = \delta_j^{C-1}(n) \cdot a_k^{C-2}(n) \quad (2.31)$$

Que aplicada a (2.25) quedaría

$$w_{kj}^{C-2}(n) = w_{kj}^{C-2}(n-1) + \alpha \delta_j^{C-1}(n) \cdot a_k^{C-2}(n) \quad (2.32)$$

en la que $k=1,2,\dots,n_{C-2}$ y $j=1,2,\dots,n_{C-1}$. Esta expresión nos muestra la forma en la que han de variar los pesos de las conexiones entre neuronas de capas sucesivas de la red, siempre que ninguna de ellas se corresponda con la capa de salida. Como se puede observar, tal variación sólo depende de la salida de la neurona antecesora ($a_k^{C-2}(n)$) y del error en la salida de la neurona posterior ($\delta_j^{C-1}(n)$). A diferencia de lo que ocurría con las neuronas de la capa de salida, el cálculo del término δ correspondiente a las neuronas de las capas ocultas, necesita la derivada de la función de transferencia y la suma de los términos δ ponderados por los pesos de las conexiones existentes entre las neuronas de las capas penúltima y de salida de la red (2.30).

La expresión (2.32) puede generalizarse a cualquier conjunto de capas sucesivas C y $C+1$

$$w_{kj}^C(n) = w_{kj}^C(n-1) + \alpha \delta_j^{C+1}(n) \cdot a_k^C(n) \quad (2.33)$$

en la que $k=1,2,\dots,n_c$, $j=1,2,\dots,n_{c+1}$, $c=1,2,\dots,C-2$, quedando definido $\delta_j^{c+1}(n)$ como:

$$\delta_j^{c+1}(n) = f' \left(\sum_{k=1}^{n_c} w_{kj}^c \cdot a_k^c + u_j^c \right) \cdot \sum_{i=1}^{n_{c+1}} \delta_i^{c+2}(n) \cdot w_{ji}^c \quad (2.34)$$

Para la determinación de la variación de los bias de las neuronas de las capas ocultas, volveremos a considerar los umbrales como una conexión más con una entrada fija e igual a 1:

$$u_j^{c+1}(n) = u_j^{c+1}(n-1) + \alpha \cdot \delta_j^{c+1}(n) \quad (2.35)$$

siendo $j=1,2,\dots,n_{c+1}$ y $c=1,2,\dots,C-2$.

Para calcular los valores de δ en (2.21) y (2.34), se necesita conocer la derivada de la función de transferencia de la neurona correspondiente. Tal y como se ha mencionado anteriormente, la red MLP ha de implementar funciones de transferencia necesariamente no lineales en las neuronas de sus capas ocultas. Además y para poder emplear este algoritmo de entrenamiento, dichas funciones también han de cumplir la condición de continuas, no decrecientes y derivables en todos sus puntos (Flórez López & Fernández Fernández, 2008).

La obtención de la derivada a aplicar dependerá, por tanto, de la función de activación elegida. En las redes objeto de la presente tesis se ha empleado únicamente la función de transferencia Tangente Hiperbólica Sigmoidea para las neuronas de las capas ocultas.

Valor de δ para el caso de emplear la función tangente hiperbólica sigmoidea

La derivada de la función tangente hiperbólica es conocida. Se puede demostrar que, a partir de ella, se puede llegar a la siguiente expresión:

$$\left. \begin{array}{l} f(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \\ f'(x) = \frac{1}{\cosh^2 x} \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{1}{\cosh^2 x} = 1 - \text{Tangh}^2 x \Rightarrow \boxed{f'(x) = 1 - f^2(x)} \quad (2.36)$$

Por lo tanto, las expresiones (2.21) y (2.34) serían iguales a

$$\delta_i^c(n) = -(s_i(n) - y_i(n)) \cdot (1 - y_i^2(n)) \quad (2.37)$$

Para las neuronas de la capa de salida y para $i=1,2,\dots,n_c$.

$$\delta_j^{c+1}(n) = (1 - a_j^{c+2}(n)) \cdot \sum_{i=1}^{n_{c+1}} \delta_i^{c+2}(n) \cdot w_{ji}^c \quad (2.38)$$

Para el resto de las neuronas de las capas ocultas y para $j=1,2,\dots,n_{C+1}$ y $C=1,2,\dots,C-2$.

2.5.1.1. Razón de aprendizaje y momento

El proceso de entrenamiento debe terminar cuando se cumpla que $\partial E/\partial w \approx 0$, momento en el que los pesos y bias (denominados parámetros de la red) no presentarán cambios significativos en iteraciones consecutivas, significando que se ha llegado a un mínimo en la función de error E . Esta función puede representarse por medio de una superficie compleja, definida por los parámetros de la red y el valor del error que originan y en la que se intenta llegar al mínimo global al que no siempre se llega. Esta superficie presenta múltiples máximos y mínimos locales, pudiendo ocurrir que el proceso de entrenamiento llegue hasta un mínimo local que se encuentre lejos del mínimo global deseado. En la (Imagen 2-10) se pueden ver diferentes trayectorias seguidas por el algoritmo del descenso del gradiente, sobre una superficie de error que depende únicamente de dos parámetros. Solo la de color rojo alcanza el mínimo global de la función deseado, mientras que las restantes conducen a mínimos locales.

En la expresión (2.15), el cambio en el peso de la conexión de la red es proporcional a la variación del error, pero también lo es respecto del parámetro α (tasa o razón de aprendizaje). Tal y como se comentó entonces, su finalidad es la de controlar la velocidad de variación de los pesos de la red, pues representa la pendiente del gradiente de la función de error en su sentido negativo, sobre la superficie de dicha función. Por tanto, α controla la velocidad con la que el algoritmo convergerá hacia la solución considerada como ideal.

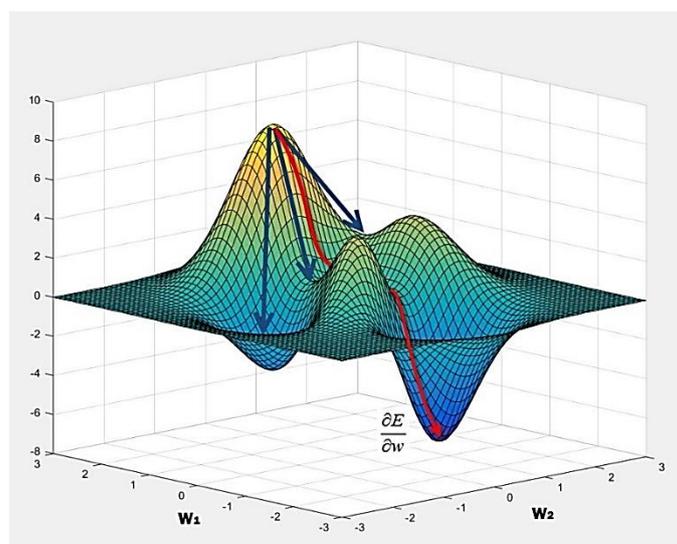


Imagen 2-10: Representación de la superficie de error para dos parámetros

Puede pensarse que un valor de α elevado provocaría una convergencia más rápida del algoritmo, requiriéndose un menor tiempo de entrenamiento. Por la misma razón, un valor pequeño generaría variaciones pequeñas en los pesos, lo que obligaría a procesos de entrenamiento muy largos en el tiempo. Ambos planteamientos han demostrado ser parcialmente incorrectos, ya que elevadas tasas pueden provocar que la función de coste sobrepase los mínimos o, lo que puede ser peor, que permanezca oscilando en torno a un mínimo que podría ser el mínimo óptimo que minimizase la función de coste. Por el contrario, valores pequeños de α pueden evitar los problemas anteriores, pero lo hacen a costa de obligar al algoritmo a realizar un elevado número de iteraciones, lo que conlleva un tiempo de convergencias mucho más elevado.

Un método para reducir la inestabilidad del algoritmo como consecuencia de la inclusión de la tasa de aprendizaje, es la modificación de la ecuación (2.15) por la ecuación (2.39) en la que se ha incluido un elemento más al que denominaremos "Momento (η)"

$$w(n) = w(n-1) - \alpha \frac{\partial e(n)}{\partial w} + \eta \Delta w(n-1) \quad (2.39)$$

donde

$$\Delta w(n-1) = w(n-1) - w(n-2) \quad (2.40)$$

La expresión (2.40) refleja la variación sufrida por los parámetros de la red en la iteración inmediata anterior, estando afectada por el valor de η siendo ($\eta > 0$). El parámetro momento controla la "importancia" que hay que asignarle a esta variación, actuando a modo de inercia respecto de variaciones anteriores. Así, la expresión $\eta \cdot \Delta w(n-1)$ permite evitar aquellas situaciones que conducen a oscilaciones sobre una misma región de la superficie de error. Cuando el algoritmo se encuentra oscilando sobre un mínimo local como consecuencia de un valor del parámetro α incorrecto, si la variación del parámetro en las iteraciones previas fue brusco, se produce un salto en el gradiente suficientemente grande como para pasar sobre el mínimo local. Si por el contrario las variaciones previas del parámetro han sido suaves, el proceso no dispondrá de suficiente inercia y no será capaz de sobrepasar el mínimo local alcanzado. Así aplicando sucesivamente (2.39) sobre (2.40) tendremos que

$$\Delta w(n-1) = w(n-1) - w(n-2) \Rightarrow \quad (2.41)$$

$$\Delta w(n-1) = -\alpha \frac{\partial e(n-1)}{\partial w} + \eta \Delta w(n-2) = \dots = -\alpha \sum_{t=0}^{n-1} \eta^{n-1-t} \frac{\partial e(t)}{\partial w}$$

por lo que (2.40) podrá escribirse finalmente como

$$w(n) = w(n - 1) - \alpha \sum_{t=0}^n \eta^{n-t} \frac{\partial e(t)}{\partial w} \quad (2.42)$$

En la expresión anterior, puede apreciarse que la variación de los parámetros de la red que se modifican en cada iteración, lo hacen conforme al sumatorio de los gradientes del error de las iteraciones anteriores ponderado por la tasa de aprendizaje. Cuando en iteraciones consecutivas el gradiente del error respecto de pesos y umbrales ha tenido el mismo signo, el término del momento genera un cambio mayor en el peso, lo que provoca una convergencia más rápida del algoritmo. Si por el contrario, el signo del gradiente en iteraciones sucesivas ha tenido signos opuestos, el sumatorio contrarrestará el cambio de los parámetros con tasas de aprendizaje más pequeñas, provocando cambios más suaves de los parámetros de la red, una convergencia más lenta, más estable y sin oscilaciones bruscas.

Respecto a cuando se realiza la variación de los parámetros de la red y el cálculo del gradiente, la bibliografía consultada muestra diferentes criterios que conducen a variantes del algoritmo BP. Todos ellos se diferencian en el número de iteraciones que se ha de dar con los datos de entrada, antes de proceder al cálculo del gradiente y a la modificación de los parámetros de la red. En la variante denominada "*Batch Gradient Descent*", el gradiente se calcula para cada iteración y sobre todas las muestras del conjunto de datos de entrenamiento. En el denominado "*Stochastic Gradient Descent*", el gradiente que se aplica es el obtenido a partir de una muestra aleatoria del gradiente de una de las muestras y no con el gradiente de cada muestra. De esta forma, el tiempo de cómputo se reduce considerablemente. Otra tercera forma alternativa, es la de tomar el gradiente de las muestras pertenecientes a un subconjunto aleatoriamente seleccionado de entre el total de muestras de entrenamiento. A esta forma se le denomina "*Mini-Batch Gradient Descent*". Por último, el denominado simplemente como "*Proceso Batch*" modifica los parámetros de la red después de haberse procesado todos los patrones de entrenamiento disponibles y no después de la presentación de cada uno de ellos.

2.5.1.2. Deficiencias del algoritmo.

Este algoritmo no está exento de deficiencias, algunas de las cuales se describen a continuación:

- Finalización del algoritmo en mínimos locales

Cuando la red cae en un mínimo local, suele deberse a que ésta no dispone de suficiente información para la representación interna del problema. La red no es

capaz de distinguir patrones diferentes y, por tanto, proporciona las mismas salidas para dichos patrones. Una solución puede ser el incremento del número de neuronas ocultas, bien incrementando el número de capas de neuronas ocultas, bien incrementando el número de ellas en cada capa, lo que conllevaría que la red consiguiese una mayor representatividad del problema. Otra solución puede ser la utilización de razones de aprendizaje variables y decrecientes. Al inicio del proceso de entrenamiento, las modificaciones de los parámetros de la red podrían ser bruscas. Conforme evoluciona dicho proceso y se van logrando errores cada vez más pequeños, las modificaciones se deberían ir suavizando, con lo que el proceso no pasaría por encima de posibles mínimos. Otras soluciones que se plantean en la bibliografía consultada, pasan por comenzar el proceso de entrenamiento desde diferentes posiciones iniciales o por añadir ruido que dificulte el estancamiento en mínimos al principio del proceso.

- Parálisis

También recibe el nombre de "Saturación" y se produce cuando las entradas de una neurona toman valores absolutos elevados. Bajo estas circunstancias, las funciones de activación no lineales (Imágenes 2-4e y f) toman valores cercanos a ± 1 , donde son asintóticas, presentando como únicos valores los máximo y mínimo de activación.

Según lo especificado por las expresiones (2.37) y (2.38) el ajuste de los parámetros de la red es proporcional a la salida de las neuronas precedentes a aquella en la que se está realizando la modificación de sus parámetros (de forma general según la expresión $y_j(n) \cdot (1 - y_j(n))$). Si la salida de una neurona está saturada, su salida será 0 o muy próxima a 0, ya que o bien se cumple que $y_j(n)=0$ o bien que $y_j(n) = 1$. Cuando se produce este fenómeno de parálisis, los parámetros de la red permanecen invariables durante un espacio de tiempo que puede llegar a ser significativo, con lo que el sumatorio de errores locales permanece constante. Aunque este fenómeno puede llegar a confundirse con el de un estancamiento en un mínimo local, pues en ambos casos se produce una invariabilidad del error, si se mantiene la ejecución del algoritmo durante el tiempo suficiente, el error puede comenzar a decrecer de nuevo.

El fenómeno de parálisis suele producirse cuando la inicialización de los parámetros de la red al inicio del proceso de entrenamiento, se realiza con valores elevados. Por ello, es posible evitar esta situación si la inicialización aleatoria de los valores de los parámetros de la red, se realiza con valores iniciales próximos a 0.

- Tiempos de cómputo

El algoritmo BP presenta un problema cuando se aplica para el entrenamiento de redes neuronales con más de una capa oculta. Este problema es el de la diferente velocidad con la que se realiza el ajuste de los pesos. Los pesos de las primeras capas (las más cercanas a la capa de entrada) se ajustan más lentamente que las últimas y ello se hace más notable a medida que aumenta el número de capas ocultas. Como es lógico, dicha disminución de velocidad repercute en la velocidad con la que la red aprende. A este problema se le denomina "*Vanishing Gradient Problem*". Este problema genera un dilema para la resolución de problemas complejos, en los que se requiere el uso de ANN con varias capas de neuronas ocultas: cuanto mayor es el número de capas ocultas, mayor puede ser la dificultad del problema a resolver, pero también lo es el tiempo de cómputo requerido para el entrenamiento de la red, la dificultad de la programación de la misma y el rendimiento general de la red se reduce considerablemente. La resolución del problema está en camino y pasa por la concurrencia de tres hechos:

- Hardware más rápido con la aplicación de técnicas de programación paralela que desvían el cómputo de la CPU hacia la GPU de las tarjetas gráficas.
- Datasets más grandes gracias a las grandes Bases de Datos de acceso colaborativo, que permiten disponer de grandes conjuntos de datos para el entrenamiento de las redes neuronales profundas, sin llegar al sobreentrenamiento de la red.
- Refinamiento de los algoritmos, también el BP, que evitan los problemas de sobreentrenamiento y elevado tiempo de cómputo que antes se producían, así como la implementación de nuevas funciones de transferencia como la ReLu (REctified Linear Unit) descrita en el punto 2.3.2 de este documento.

2.5.2. Algoritmos del Gradiente Conjugado Escalado y de Levenberg-Marquardt.

El entrenamiento de una ANN no deja de ser un ejercicio de optimización numérica, de una función normalmente no lineal y multivariable que depende de los pesos de las conexiones. Se puede decir que no hay un único método mejor para la optimización no lineal y es necesario elegir uno basado en las características del problema a resolver, como puede ser el número de pesos de la arquitectura de red elegida o la cantidad de memoria disponible en el equipo informático en el que la red va a ser entrenada. Para las funciones utilizadas en las ANN, se han encontrado tres

tipos generales de algoritmos que son efectivos para la mayoría de los propósitos prácticos, requiriendo todos ellos la misma cantidad de memoria, que suele ser proporcional al cuadrado del número de pesos:

- Para un número reducido de pesos, los algoritmos más eficientes son los de Newton, Gauss-Newton y variantes de algoritmos de Levenberg-Marquardt.
- Para un número moderado de pesos, los algoritmos más eficientes son los basados en los algoritmos cuasi-Newton.
- Para un gran número de pesos, los algoritmos más eficientes son los que toman como base algoritmos del gradiente conjugado.

Como algoritmos para las redes de esta tesis, se han empleado las variantes del Gradiente Conjugado Escalado y de Levenberg-Marquardt. Ambos métodos encuentran óptimos locales no garantizándose que encuentren un óptimo global. En la práctica, Levenberg-Marquardt suele encontrar mejores óptimos y con menor número de iteraciones que el Gradiente Conjugado Escalado, pero lo hace con un conjunto de cálculos muy superior siendo el coste computacional mucho más elevado.

2.5.2.1. Algoritmo del Gradiente Conjugado Escalado.

MatLab presenta, para las versiones 2017a, 2018a utilizadas en los tres artículos, 4 variantes del algoritmo del Descenso del Gradiente.

- "Trainscg" para el "Scaled Conjugate Gradient Backpropagation"
- "Traincgp" para el "Conjugate Gradient Backpropagation with Polak-Ribière updates"
- "Traincgf" para el "Conjugate Gradient Backpropagation with Fletcher-Reeves updates"
- "Traincgb" para el "Conjugate Gradient Backpropagation with Powell-Beale restarts".

Todas ellas tienen en común utilizar el "*Gradiente Conjugado*", que busca la dirección p en la que se produce el descenso más pronunciado (Gradiente) g en la primera iteración (0).

$$p_0 = -g_0 \quad (2.43)$$

A continuación, se realiza una búsqueda lineal para determinar la distancia óptima x a la que se moverá a lo largo de la dirección actual:

$$x_{k+1} = x_k \cdot \alpha_k \cdot p_k \quad (2.44)$$

El siguiente paso será la determinación de la siguiente dirección de tal forma que sea conjugada (ortogonal) con la dirección de búsqueda anterior. Para ello se combinará la nueva dirección de descenso más pronunciado con la dirección de búsqueda anterior:

$$p_k = -g_k + \beta_k \cdot p_{k-1} \quad (2.45)$$

Las diferentes versiones del algoritmo del Gradiente Conjugado se distinguen por la forma de calcular la constante β_k , o la forma de actualizar sus valores característicos. Así

- La variante del Gradiente Conjugado Escalado no busca la nueva dirección en cada iteración, sino que evita buscar las nuevas direcciones utilizando un enfoque similar al descrito para el método de Levenberg-Marquardt, escalando el tamaño del paso de cada iteración. (Fodslette Møller, 1993)
- La variante del algoritmo de actualización de Polak-Ribière obtiene (β_k) mediante la razón entre el producto interno del cambio anterior del gradiente con el gradiente actual y la norma al cuadrado del gradiente anterior (g_{k-1})

$$\beta_k = \frac{\Delta g_{k-1}^T \cdot g_k}{g_{k-1}^T \cdot g_{k-1}} \quad (2.46)$$

- La variante del algoritmo de actualización de Fletcher-Reeves contempla que la forma de obtener (β_k) es mediante la razón entre las normas al cuadrado del gradiente actual (g_k) y del gradiente anterior (g_{k-1}). Requiere menor cantidad de memoria que la variante anterior

$$\beta_k = \frac{g_k^T \cdot g_k}{g_{k-1}^T \cdot g_{k-1}} \quad (2.47)$$

- En todos los algoritmos de gradiente conjugado, la dirección de descenso se reajusta periódicamente al sentido del gradiente negativo. El punto en el que se ha de realizar el reajuste, habitualmente se toma cuando el número de iteraciones iguala al número de parámetros de la red (pesos más bias), pero hay otros métodos de reajuste que pueden mejorar la eficiencia del entrenamiento. El método de reajuste de Powell-Beale se basa en reiniciar la dirección de descenso si queda muy poca ortogonalidad entre el gradiente actual y el gradiente anterior. Esto se comprueba con la siguiente desigualdad:

$$|g_{k-1}^T \cdot g_{k-1}| \geq 0.2 \cdot \|g_k\|^2 \quad (2.48)$$

Si se cumple esta condición, la dirección de búsqueda se reajusta al negativo del gradiente. De las 4 variantes es la que más recursos de memoria emplea.

Los algoritmos de gradiente conjugado suelen ser mucho más rápidos que los de retropropagación del error con tasa de aprendizaje variable, requiriendo sólo un poco más de memoria. Por esta razón son los más adecuados para redes con un gran número de conexiones.

2.5.2.2. Algoritmo de Levenberg-Marquardt.

Al igual que los métodos de optimización del descenso del gradiente cuasi-Newton, el algoritmo de Levenberg-Marquardt (Moré, 1978) fue diseñado para aproximar rápidamente el entrenamiento de segundo orden sin tener que calcular la matriz Hessiana. Cuando la función de error tiene la forma de una suma de cuadrados (forma típica en el entrenamiento de redes feedforward), entonces la matriz Hessiana (H) que contiene las segundas derivadas de los errores de la red respecto de los pesos y bias, se puede aproximar a partir de la matriz Jacobiana (J) mediante la expresión:

$$H = J^T \cdot J \quad (2.49)$$

y el gradiente puede ser calculado por medio de la expresión:

$$g = J^T \cdot e \quad (2.50)$$

donde la matriz Jacobiana (J) contiene las primeras derivadas de los errores de la red con respecto a los pesos y bias, y (e) es el vector de errores de la red. La matriz Jacobiana puede calcularse mediante la técnica de retropropagación analizada anteriormente, que es mucho menos compleja que el cálculo de la matriz Hessiana. El algoritmo de Levenberg-Marquardt utiliza la aproximación a la matriz Hessiana mediante la siguiente actualización de tipo Newton:

$$x_{k+1} = x_k - [J^T \cdot J + \mu \cdot I]^{-1} \cdot J^T \cdot e \quad (2.51)$$

Cuando $\mu=0$, la expresión anterior coincide con el método de optimización de Newton utilizando la matriz Hessiana aproximada. Cuando μ tiene un valor grande, la expresión anterior coincide con la del descenso de gradiente con un tamaño de paso pequeño. El método de Newton es más rápido y preciso cuanto más cerca se está del mínimo de la función de error, razón por la que se intenta cambiar hacia el método de Newton tan rápido como sea posible. Por tanto, el valor de μ se reduce después de cada paso dado con éxito por haberse reducido la función de error. Por el contrario,

el valor de μ se incrementa cuando el paso que se ha tentado aumenta la función de error. De este modo, la función de error siempre se reduce en cada iteración del algoritmo.

Este algoritmo parece ser el método con mejor relación velocidad-eficiencia para entrenar redes neuronales feedforward de tamaño moderado.

2.6. Capacidad de generalización de las Redes Neuronales Artificiales.

La evaluación de la bonanza de un modelo de red neuronal no debe fundamentarse únicamente en los resultados obtenidos durante el proceso de aprendizaje. Si la red responde satisfactoriamente solo si se le presentan los datos con los que ha sido entrenada y no cuando se le presentan patrones nuevos, se dice que la red ha "memorizado" los datos de entrenamiento, en lugar de haber "aprendido" de ellos. Es a lo que se denomina "pérdida de la capacidad de generalización de la red". Durante el entrenamiento, la red debe ser capaz de extraer la información que caracteriza los datos de las muestras empleadas, así como las relaciones inherentes a los mismos. Esta singularidad es a la que se denomina "capacidad de generalización de la red". (Imagen 2-11).

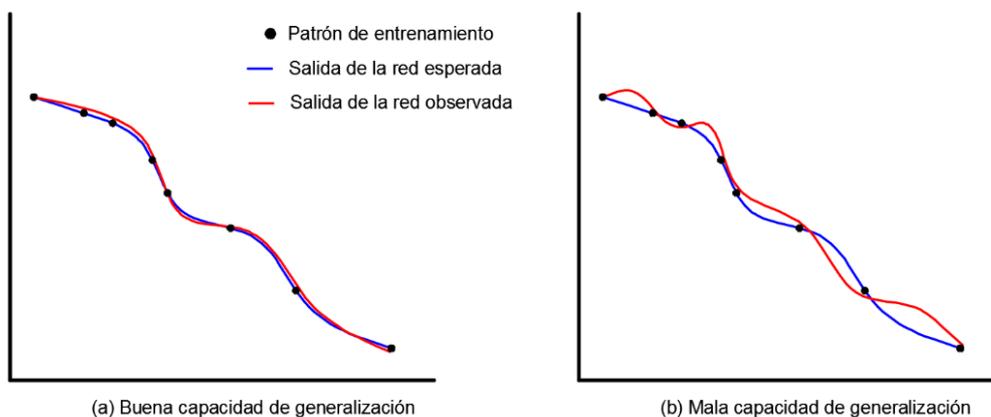


Imagen 2-11: Representación de la capacidad de generalización de una red

Para determinar en cuál de estas dos situaciones posibles se encuentra la capacidad de generalización de nuestra red durante el entrenamiento, es preciso disponer de dos conjuntos de patrones durante el entrenamiento. Uno de ellos permitirá el entrenamiento tal y como se ha descrito (*conjunto de entrenamiento*), mientras que el otro servirá para evaluar la respuesta de la red ante la presentación de patrones de datos no utilizados para el entrenamiento (*conjunto de validación*). Ambos conjuntos han de salir de los datos de muestra disponibles sobre el problema a resolver, siendo

conveniente que la partición de ambos conjuntos sea aleatoria y no necesariamente del mismo tamaño. Así, conjuntos de entrenamiento y validación serán igual de representativos del problema.

Durante el proceso de entrenamiento y cada cierto número de epochs (iteraciones en las que se han pasado a la red todos los pares de datos de entrenamiento), se le presenta a la red el conjunto de validación obteniéndose el error generado. De la misma forma que se analiza la tendencia del error producido con los datos de entrenamiento y en epochs sucesivas, también se ha de analizar la tendencia del error cometido con los datos de validación. La evolución de ambos errores determinará el momento en el que la red comienza a perder su capacidad de generalización, y en el que puede decirse que la red empieza a sobreentrenarse o a disponer de un sobreaprendizaje (Imagen 2-12).

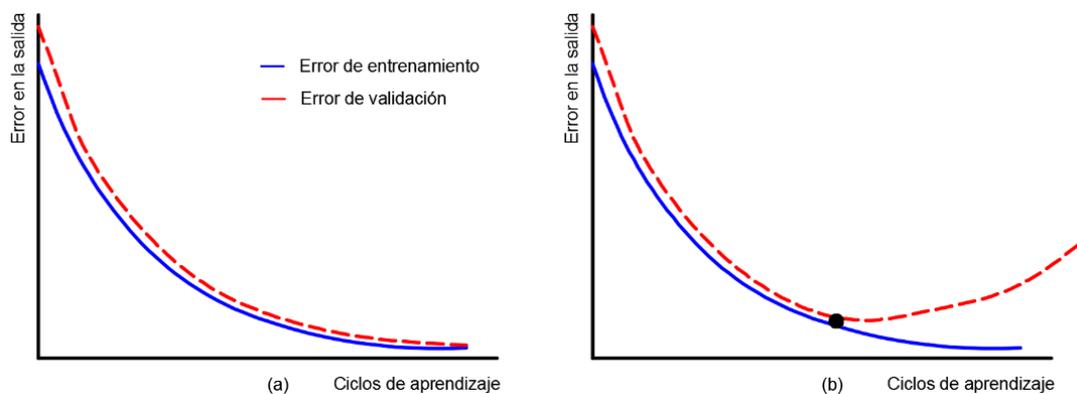


Imagen 2-12: Representación del inicio de sobreentrenamiento de una red

El problema del sobreentrenamiento suele producirse por varias razones. Entre ellas están las del empleo de un elevado número de neuronas ocultas en la red, o de un excesivo número de ciclos de entrenamiento. En cualquier caso, la red ajusta con mucha precisión sus parámetros a los datos de entrada, pero sin extraer las características y relaciones inmersas en los mismos, perdiendo con ello capacidad de generalizar el problema. En el caso concreto de muestras de datos de entrada con mucho ruido, la red se ajustaría al ruido y no a los datos del problema.

Para intentar reducir el riesgo de sobreajuste, sobre todo cuando se dispone de un tamaño muestral pequeño, se pueden utilizar diferentes técnicas denominadas de regularización y que se enumeran a continuación:

- Reducción del valor de los parámetros, introduciendo una penalización en función del valor alcanzado por los pesos. De alguna forma se evita, también, el problema de Parálisis descrito en el punto 2.5.1.2 de este documento.

- Incremento del tamaño muestral de los datos de entrenamiento (Data augmentation). Consiste en añadir, a los datos del conjunto de entrenamiento, más "muestras nuevas" surgidas de realizar pequeñas modificaciones a los datos existentes. En el caso de redes neuronales encargadas de clasificar o reconocer formas en fotografías, consistiría en generar nuevas fotos, a partir de la ya existentes, pero realizando modificaciones en la imagen original como son volteados, rotaciones, aplicar deformaciones en la perspectiva, cambios de brillo, contraste o saturación, introducción de ruido, etc. Si los datos de entrada son numéricos, aplicando pequeñas variaciones a los mismos que no supongan un cambio de clase evidente.
- Desactivación aleatoria de un porcentaje de las neuronas en cada capa oculta, por cada nueva entrada de datos en la red durante la fase de entrenamiento. La desactivación ha de realizarse acorde a una probabilidad previamente definida, que puede ser la misma para toda la red o distinta para cada capa. Lo que se pretende es evitar que las neuronas memoricen los datos de entrada. Esta técnica se denomina "Dropout" y requiere una cierta compensación que equilibre el número de neuronas activas diferente que hay durante el entrenamiento (parte de las neuronas desactivadas premeditadamente) y en la fase de explotación (todas las neuronas activas). En la práctica, este método fija a 0 la salida de un conjunto aleatorio de neuronas en cada iteración del proceso de entrenamiento. Después de cada iteración, las neuronas recuperan su valor volviéndose a elegir otro conjunto de neuronas al azar, a las que se le vuelve a asignar una salida a 0. (López Sánchez et al., 2007; Méndez & Ibarra, 2014).

2.7. Métricas de bonanza.

Tratan de evaluar la capacidad de generalización de la red y la bonanza de la arquitectura elegida para resolver el problema que ha motivado su construcción. Son dos los gráficos utilizados para las redes de esta tesis: Matriz de confusión y curvas ROC.

2.7.1. Matrices de confusión

Una "matriz de confusión" es una herramienta que permite determinar y representar la bonanza de un algoritmo que emplea un aprendizaje supervisado, para resolver un

problema de clasificación estadística. En el caso del aprendizaje no supervisado, la matriz equivalente recibe el nombre de "matriz de coincidencias". Cada fila de la matriz de confusión representa el número de predicciones de cada clase, mientras que cada columna representa a las instancias en la clase real (Imagen 2-13). Uno de los beneficios que presentan las matrices de confusión es la de facilitar si el sistema está confundiendo dos de las clases en estudio.

M. Confusion

	1	2	3	
1	30 37.5%	0 0.0%	0 0.0%	100% 0.0%
2	0 0.0%	30 37.5%	0 0.0%	100% 0.0%
3	0 0.0%	0 0.0%	20 25.0%	100% 0.0%
	100% 0.0%	100% 0.0%	100% 0.0%	100% 0.0%
	1	2	3	
	Target Class			

Imagen 2-13: Matriz de confusión para tres variables

Para su empleo es necesario que exista un equilibrio entre las muestras pertenecientes a cada una de las clases. Si los datos de entrada presentan un número de instancias de cada clase muy diferentes, la tasa de error del clasificador no es representativa de la bonanza del clasificador. Por ejemplo, si hay 900 muestras de la clase 1 y sólo 100 de la clase 2, el clasificador puede tener fácilmente un sesgo hacia la clase 1. Si el clasificador clasifica todas las muestras como clase 1 su precisión será del 90%, pero ello no significa que sea un buen clasificador, pues tuvo un 100% de error en la clasificación de las muestras de la clase 2.

En la matriz ejemplo (Imagen 2-14) hay 7 elementos de la categoría A, 8 de la B y 12 de la C. Se han clasificado correctamente 5 muestras de la clase A, 3 de la clase B y 11 de la clase C. 2 instancias de la clase A han sido clasificadas incorrectamente como de la clase B, 3 de la clase B lo han sido como de la clase A y 2 como de la clase C y 1 de la clase C lo ha sido como de la clase B. A partir del análisis de la matriz, puede apreciarse que el sistema tiene problemas para diferenciar los elementos de las clases A y B, pudiendo distinguir razonablemente los de la clase C, del resto de elementos de las restantes clases.

		Real		
		A	B	C
Observado	A	5	3	0
	B	2	3	1
	C	0	2	11

Imagen 2-14: Matriz de confusión de ejemplo para tres variables

Si se dispone de un sistema de clasificación binario (2 categorías o pertenece o no pertenece a una categoría), tendríamos las siguientes métricas de interés, que nos informarían de los errores y sesgo del algoritmo evaluado, obtenibles a partir de los datos de la propia tabla (Chicco et al., 2021; Chicco & Jurman, 2020; «Encycl. Mach. Learn.», 2010; Fawcett, 2006; Powers, 2008; Stehman, 1997):

		Real	
		P(+)	N(-)
Observado	(+)	TP	FP
	(-)	FN	TN

TP -> Verdaderos Positivos (True Positives)
 FP -> Falsos Positivos (False Positives) (Error tipo I)
 FN -> Falsos Negativos (False Negatives) (Error tipo II)
 TN -> Verdaderos Negativos (True Negatives)
 Total muestras T = TP + FP + FN + TN
 P = TP + FN (Positivos reales en los datos)
 N = TN + FP (Negativos reales en los datos)
 Algoritmo exacto => P alto
 Algoritmo preciso => TP alto

Exactitud (Accuracy) Número de predicciones correctas

$$Acc = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}; \quad Acc = 1 - TasaError \quad (2.52)$$

Ratio o Tasa de Error (Misclassification Rate) Número de Predicciones incorrectas

$$TasaError = \frac{FP + FN}{TP + FP + FN + TN} \quad (2.53)$$

Ratio de Verdaderos Positivos, Sensibilidad o Exhaustividad (True Positive Rate, Hit Rate, Recall o Sensitivity) Proporción de casos positivos correctamente identificados

$$TPR = \frac{TP}{P} = \frac{TP}{TP + FN} = 1 - FNR \quad (2.54)$$

Ratio de Verdaderos Negativos o Especificidad (True Negative Rate, Specificity, Selectivity) Proporción de casos negativos correctamente identificados

$$TNR = \frac{TN}{N} = \frac{TN}{TN + FP} = 1 - FPR \quad (2.55)$$

Precisión Equilibrada (Balanced Accuracy)

$$BA = \frac{TPR + TNR}{2} \quad (2.56)$$

Precisión o Valor de Predicción Positivo (Precision o Positive Predictive Value)

Grado de dispersión de los valores obtenidos después de mediciones repetidas. Es la proporción del número de predicciones correctas (tanto positivas como negativas por separado) respecto del total de las predicciones. Habitualmente se refiere a la proporción de casos positivos correctamente identificados de entre todos los positivos

$$PPV = \frac{TP}{TP + FP} = 1 - FDR \quad (2.57)$$

Valor de Predicción Negativo (Negative Predictive Value) Proporción de casos negativos correctamente identificados de entre todos los negativos

$$NPV = \frac{TN}{TN + FN} = 1 - FOR \quad (2.58)$$

Ratio o Razón de Falsos Positivos (Fall-Out o False Positive Rate) Proporción de casos negativos incorrectamente clasificados como positivos (Falsos Positivos) y el número total de negativos reales con independencia de cómo han sido clasificados

$$FPR = \frac{FP}{N} = \frac{FP}{TN + FP} = 1 - TNR \quad (2.59)$$

Ratio o Razón de Falsos Negativos (Miss Rate o False Negative Rate) Proporción de casos positivos incorrectamente clasificados como negativos (Falsos Negativos) y el número total de positivos reales con independencia de cómo han sido clasificados

$$FNR = \frac{FN}{P} = \frac{FN}{FN + TP} = 1 - TPR \quad (2.60)$$

Ratio o Razón de Falsos Descubrimientos (False Discovery Rate) Es la proporción esperada del número de clasificaciones Positivas Falsas respecto del total de clasificaciones positivas

$$FDR = \frac{FP}{FP + TP} = 1 - PPV \quad (2.61)$$

Ratio o Razón de Falsas Omisiones (False Omission Rate) Es la proporción esperada del número de clasificaciones Negativas Falsas respecto del total de clasificaciones negativas

$$FOR = \frac{FN}{FN + TN} = 1 - NPV \tag{2.62}$$

Umbral de Prevalencia (Prevalence Threshold) La probabilidad de que un positivo lo sea realmente, depende de lo frecuente o raro que sea serlo en la población de la que procede.

$$PT = \frac{\sqrt{TPR \cdot (-TNR + 1)} + TNR - 1}{TPR + TNR - 1} \tag{2.63}$$

Nivel de amenaza (Threat Score) La razón de los que pueden ser positivos verdaderos, frente al total de positivos reales y los predichos como tal erróneamente

$$TS = \frac{TP}{TP + FN + FP} \tag{2.64}$$

Puntuación F1 (F1 Score, harmonic mean) Relaciona las métricas de Precisión y Sensibilidad por medio de la Media Armónica

F1 Score = 2 * (Sensibilidad * Precisión) / (Sensibilidad + Precisión)

$$F_1 = 2 \cdot \frac{PPV \cdot TPR}{PPV + TPR} = \frac{2 \cdot TP}{2 \cdot TP + FP + FN} \tag{2.65}$$

$$F_1 = 2 \cdot \frac{Sensibilidad \cdot Precisión}{Sensibilidad + Precisión}$$

Según esta métrica podemos tener 4 situaciones diferentes (Imagen 2-15):

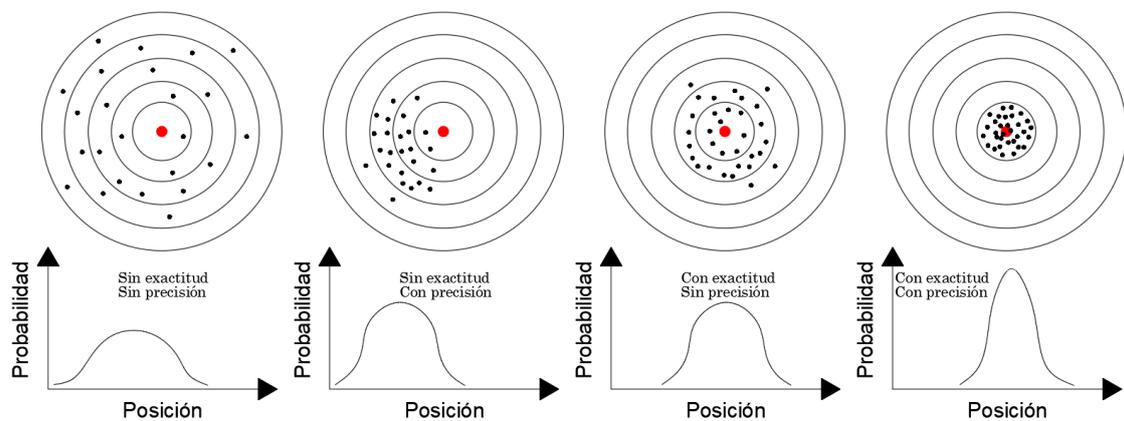


Imagen 2-15: Representación de los conceptos de exactitud y precisión

- Alta precisión y alta exactitud: El modelo diferencia perfecta y únicamente los elementos de esa clase.
- Alta precisión y baja exactitud: El modelo no distingue bien los elementos de la clase pero, de hacerlo correctamente, presenta una elevada confianza.
- Baja precisión y alta exactitud: El modelo detecta los elementos de la clase, pero incluyendo elementos pertenecientes a otras clases.
- Baja precisión y baja exactitud: El modelo no logra clasificar los elementos de esa clase.

Como se ha comentado anteriormente, si el entrenamiento se realiza con datos cuyas clases presentan cardinalidades notablemente diferentes, suele producirse un sesgo positivo hacia la clase mayoritaria, lo que genera una elevada precisión en la clase mayoritaria y una baja sensibilidad en la clase minoritaria.

Coeficiente de Correlación de Matthews (Matthews Correlation Coefficient) Mide la calidad de las clasificaciones binarias y tiene en cuenta los verdaderos y falsos positivos y negativos. Esta métrica depende del conjunto de datos y puede ser utilizada como media equilibrada incluso si las clases son de tamaños muy diferentes, situación en la que el resto de los estadísticos analizados no son válidos. Es, en esencia, un coeficiente de correlación entre las clasificaciones binarias observadas y predichas devolviendo valores en el rango $[-1, 1]$. Un valor de 1 representa una predicción perfecta, 0 el resultado de una predicción aleatoria y -1 indica un desacuerdo total entre predicción y observación. Está relacionado con el estadístico chi-cuadrado para una tabla de contingencia 2×2 . Hay diferentes formas de calcularlo:

$$MCC = \frac{TP \cdot TN - FP \cdot FN}{\sqrt{(TP+FP)(TP+FN)(TN+FP)(TN+FN)}} \quad (2.66)$$

$$MCC = \sqrt{PPV \cdot TPR \cdot TNR \cdot NPV} - \sqrt{FDR \cdot FNR \cdot FPR \cdot FOR}$$

Aunque su fórmula original es

$$T = TN + TP + FN + FP \quad (2.67)$$

$$MCC = \frac{\frac{TP - (TP+FN) \cdot (TP+FP)}{T}}{\sqrt{\frac{(TP+FP)(TP+FN)}{T} \cdot \left(1 - \frac{(TP+FN)}{T}\right) \cdot \left(1 - \frac{(TP+FP)}{T}\right)}}$$

Índice de Fowlkes–Mallows (Fowlkes–Mallows index) Es un método de evaluación externa que permite determinar el grado de similitud entre dos agrupaciones obtenidas tras la ejecución de un determinado algoritmo. También sirve como métrica para las matrices de confusión. Valores altos del índice indican una mayor similitud entre las agrupaciones y las clasificaciones de referencia.

$$FM = \sqrt{PPV \cdot TPR} = \sqrt{\frac{TP}{TP+FP} \cdot \frac{TP}{TP+FN}} \quad (2.68)$$

Índice de Youden (Youden's J, Informedness o Bookmaker Informedness) Es un estadístico único que capta el rendimiento de una prueba dicotómica y generalizándola a una clasificación multicategórica, estima la probabilidad de una decisión informada.

$$J = TPR + TNR - 1 \quad (2.69)$$

Marcación de predicción (MarKedness o deltaP) El concepto de marcación se cuantifica como una medida de cuánto se postula una variable como predictor o posible causa de otra. También recibe el nombre de Δp (*deltaP*) en casos simples de dos opciones posibles.

$$MK = PPV + NPV - 1 \quad (2.70)$$

2.7.2. Curvas ROC (Receiver Operating Characteristic)

Un gráfico ROC (Característica Operativa del Receptor) es un gráfico que se desarrolló originariamente para medir el grado de detección de objetos mediante pantallas de radar. En la actualidad y dentro del campo del Machine Learning, los gráficos ROC son una representación gráfica de la sensibilidad frente a la especificidad para un sistema clasificador de dos categorías y según se varía el umbral de discriminación (valor para el cual consideramos que un caso es un positivo). Otra interpretación que se atribuye a este gráfico, es la de ser la representación de la proporción entre el ratio de verdaderos positivos (TPR) (2.54) y el ratio de verdaderos negativos (TNR) (2.55), también según se varía el umbral de discriminación. La curva ROC representa la tasa de positivos falsos frente a positivos verdaderos. (Imagen 2-16) (Fawcett, 2006).

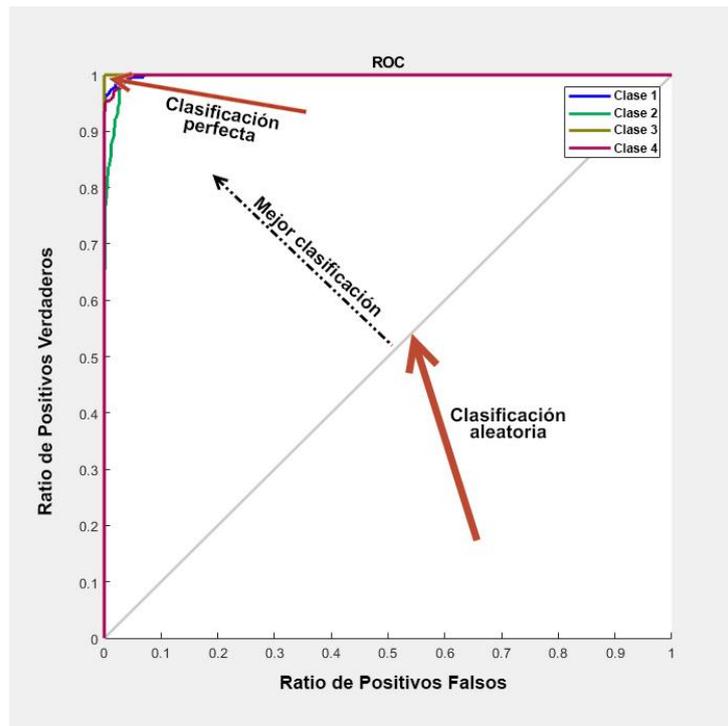


Imagen 2-16: Curva ROC y elementos significativos

Del gráfico se puede decir, además:

- Cuando la curva se traza entre los puntos (0,0) y (0,1), tenemos el clasificador perfecto: clasifica todos los casos positivos y negativos correctamente. El par (0,1) representa la tasa de positivos falsos (0) y la tasa de positivos verdaderos (1).
- El punto (0,0) representa un clasificador que predice que todos los casos serán negativos
- El punto (1,1) representa un clasificador que predice que todos los casos sean positivos.
- El punto (1,0) representa un clasificador que no predice.
- Un gráfico ROC engloba a toda la información contenida en la matriz de confusión. Ello se debe a que el número de FN es el complemento del valor de TP ($P=TP + FN$) y el valor de TN es el complemento del valor de FP ($N=TN + FP$).
- Las curvas ROC proporcionan una herramienta visual para valorar la bonanza de un modelo y su capacidad para identificar los casos positivos correctamente clasificados y el número de casos negativos que se clasifican incorrectamente.

2.8. Entrenamiento con MatLab.

Todo algoritmo ha de ser implementado, para su ejecución, en algún lenguaje de programación que puede ser presentado al usuario bajo la forma de un Entorno de Desarrollo Integrado (o IDE de Integrated Development Environment) con librerías propias o bajo licencia del Proyecto GNU y que constituyen los denominados marcos de trabajo o "*framework*", o de una aplicación informática con un Interfaz Gráfico de Usuario (o GUI de Graphical User Interface) que permita un uso amigable de la misma. También es necesario diferenciar entre aquellos que cubren una amplia variedad de métodos de aprendizaje para la resolución de problemas de regresión, agrupación y clasificación de datos y que pueden o no incluir ANN (Aprendizaje Automático o Machine Learning) y aquellos que cubren diversas topologías de ANN con muchas capas ocultas (Aprendizaje Profundo o Deep Learning). Así, Scikit-learn y Spark MLlib son frameworks de Machine Learning mientras que Keras, MXNet, PyTorch, y TensorFlow son frameworks muy conocidos de Deep Learning.

Son ampliamente conocidas las librerías y frameworks que permiten el desarrollo de ANN en JAVA (Deeplearning4j), JavaScript (TensorFlow.js, Keras.js, Brain.js, Neataptic, Synaptic, Webdnn, Compromise, Conventjs o ml.js), Python (Keras, PyTorch, TensorFlow) o dentro de la hoja de cálculo de Microsoft Excel (NeuralTools, NeuroSolutions). También existen algunas aplicaciones webs (Deep playground, DeepForge, Thing Translator) que nos permiten analizar el comportamiento de ANN de construcción propia, de forma interactiva y a través de un navegador (*10 librerías para machine learning en JavaScript - Analytics Lane*). Dentro de las aplicaciones informáticas disponibles en el mercado para la simulación de ANN, caben destacar la Neural Networks de Wolfram incluida en su programa Mathematica, SNNS (Stuttgart Neural Network Simulator) de la Universidad de Stuttgart o su más reciente predecesor Java NNS (Java Neural Network Simulator). En este sentido, es conveniente analizar estas alternativas a través de la comparativa realizada por la Universidad de Colorado (O'Reilly, 2014). Por último, las grandes tecnológicas también han desarrollado entornos de trabajo para la implementación de la IA de forma empresarial. Tal es el caso de Azure Machine Learning Studio de Microsoft, SPSS Modeler de IBM, SageMaker de Amazon o AutoML, LaMDA y MUM de Google.

En el caso de esta tesis, se han empleado la Deep Learning Toolbox de MatLab en las versiones 2017a y 2018a. Se han generado scripts que han permitido la construcción de ANN de tipo MLP FeedForward con una única capa oculta, en las que se ha determinado el número de neuronas de dicha capa de forma empírica con la ejecución de múltiples entrenamientos bajo diferentes condiciones. Para posibilitar tanto la

ejecución como la reproducción de cada uno de los entrenamientos, se han realizado las siguientes operaciones previas:

- Adecuación de los datos de entrada para su tratamiento bajo la forma de vectores y matrices de datos. El uso de la notación matricial facilita el tratamiento de estas estructuras de datos de forma iterativa.
- Obtención de un conjunto de " s " valores semilla para realizar entrenamientos desde puntos iniciales diferentes de forma reproducible. En cada entrenamiento se utilizará un valor semilla diferente, tomado de entre los s valores semilla disponibles.

Todos los entrenamientos han seguido los siguientes pasos:

1. Inicialización de los pesos y umbrales de la red de forma aleatoria utilizando uno de los valores semilla conocidos. En cada entrenamiento se parte, por tanto, de posiciones diferentes en la superficie de error.
2. Separación del conjunto de datos disponible en tres conjuntos de datos según un % para cada uno de ellos. De forma general, en las redes entrenadas la división en los grupos empleada ha sido: entrenamiento (70%), validación (15%) y test (15%). En cada entrenamiento los datos que van a cada conjunto son elegidos al azar para evitar el sesgo de la red al utilizar siempre los mismos datos para cada conjunto.
3. Se toma el siguiente patrón disponible de entrenamiento con todos los datos de entrada (el 1º si se está iniciando el proceso) y se propaga por la red para obtener las salidas observadas para dicho patrón.
4. Se evalúa el error cometido por la red comparando cada salida observada con la esperada. A este error se le denomina *Error de entrenamiento*.
5. Se modifican los pesos y umbrales de la red, según la regla de entrenamiento utilizada. En el caso de las redes entrenadas en esta tesis, las dos empleadas han sido la del Gradiente Conjugado Escalado y la de Levenberg-Marquardt.
6. Repetición de los pasos 3, 4 y 5 para cada uno de los pares de datos de entrenamiento (entrada, salida esperada), constituyendo un "*ciclo de aprendizaje*" o "*epoch*". En nuestro caso se genera una epoch cada vez que se hacen pasar todos los datos del conjunto de entrenamiento, es decir, el tamaño del batch es igual al del conjunto de datos de entrenamiento.
7. Determinación del error cometido por la red con los pares de datos del conjunto de validación. A este error se le denomina *Error de validación*.

8. Se comprueba si los errores de entrenamiento y validación siguen una tendencia a la baja:
 - 8.1. Si el error de entrenamiento sigue descendiendo pero no así el de validación que comienza a aumentar, se considera que la red comienza a sobreentrenarse, por lo que el proceso de entrenamiento se para.
 - 8.2. Si los errores de entrenamiento y validación continúan su tendencia descendente, se repiten los pasos del 3 al 7, hasta lograr un valor de error global que se considere aceptable para la red propuesta. Ello requerirá m *epochs* y el proceso de entrenamiento se parará.
9. Determinación del error cometido por la red con los pares de datos del conjunto de test. A este error se le denomina *Error de test*.
10. Obtención de las gráficas y métricas de bonanza de la red a la que se ha llegado, en función del camino seguido en el punto 8 para la paralización del proceso de entrenamiento.
11. Repetición de los puntos 1 a 10 s veces. El proceso se repite tantas veces como números semilla disponibles se tengan. Cada uno de los s entrenamientos se realiza sin variar el resto de los parámetros e hiperparámetros de la red. En el caso de las redes de la tesis, sin variar la función de transferencia o el número de neuronas en la capa oculta.

- Selección de Hiperparámetros

Los hiperparámetros son los parámetros de la red que no pueden ser aprendidos y que, por tanto, han de ser especificados de forma manual por el programador en base a su experiencia y conocimiento. En el caso de la toolbox de MatLab, los hiperparámetros Ratio de Aprendizaje y Momento han sido determinados por las propias librerías, aunque pueden ser parametrizados y configurados por el programador. El resto de los hiperparámetros como son la función de transferencia implementada en las neuronas de cada tipo de capa (oculta o salida), número de capas ocultas o el número de neuronas en dichas capas, han sido elegidos por el tesinando en base a la experiencia fruto de entrenamientos previos y han sido documentados en los respectivos artículos. En las redes objeto de esta tesis:

- Se han empleado las funciones de transferencia Tangente Hiperbólica Sigmoides para las neuronas de la capa oculta y la Lineal Pura o

SoftMax para las de la capa de salida en función de si se trataba de una red de predicción o de clasificación.

- En todos los casos y por la restringida capacidad de cómputo de los equipos disponibles, las arquitecturas empleadas sólo han tenido una única capa oculta.
- El número de neuronas de la capa oculta ha variado entre 1 y n . Cada una de las n configuraciones diferentes ha sido entrenada siguiendo los 11 puntos del apartado anterior.

La arquitectura de red elegida ha sido la que mejores valores ha obtenido en las métricas de bonanza.

2.9. Ventajas e inconvenientes de las Redes Neuronales

Las ventajas que nos ofrecen las ANN se derivan de sus principales características (Ponce Cruz, 2011):

- **Aprendizaje adaptativo** o capacidad de aprendizaje con la experiencia. La red es capaz de adaptarse al entorno de trabajo por medio del proceso de entrenamiento, durante el cual los pesos de sus conexiones sinápticas se adaptarán para poder resolver el problema planteado. Su característica más preciada es la de poder abordar problemas no lineales.
- **Autoorganización.** Las ANN disponen de la capacidad de representar la información que recibe durante el proceso de entrenamiento. Esta característica de autoorganización es la principal responsable de la capacidad de generalización de una red.
- **Tolerancia a fallos.** Una red puede conservar gran parte de su capacidad para resolver el problema para el que ha sido entrenada, aun cuando parte de su estructura haya sido modificada, alterada o destruida. A diferencia de lo que ocurre con las aplicaciones informáticas convencionales, en las que la más mínima alteración en una posición de memoria provoca una caída del sistema, en las ANN un pequeño fallo en alguna de las neuronas alterará el comportamiento de la red, pero no producirá una parada repentina de la misma. Esta propiedad es lo que se denomina como "tolerancia a fallos del sistema".

Por otro lado, también hay que destacar la "tolerancia a fallos respecto de los datos", que es la característica de las redes por la cual son capaces de trabajar con datos de entrada con ruido, incompletos, o distorsionados. Esta cualidad se

deriva de su capacidad de abstracción de la información intrínseca de los datos de entrada.

En cualquier caso de los mencionados en este punto, las ANN presentan esta particularidad como consecuencia del almacenamiento distribuido y redundante entre las conexiones interneuronales, con el que la red almacena la información.

- **Operación en tiempo real.** Cuando una red es implementada en hardware específico que pueda desarrollar un procesamiento paralelo, su velocidad de ejecución permite su utilización en entornos de trabajo que requieran respuestas en tiempo real.
- **Fácil implementación con la tecnología existente.** El nivel de integración de los circuitos electrónicos actuales posibilita la fabricación de dispositivos miniaturizados que incluyan redes neuronales complejas. Además, la tecnología neural no requiere un conocimiento matemático profundo del problema, sino estar familiarizado con los datos de trabajo.

No obstante, las ANN no están exentas de algunos inconvenientes. De entre ellos los más destacables son (Isasi Viñuela & Galván León, 2003; Ponce Cruz, 2011):

- **El tiempo de aprendizaje** no es conocido a priori. Se desconocen tanto los valores iniciales que se deben imponer, como el tiempo necesario para llegar a la convergencia del proceso. Además, este problema es independiente del tamaño y rango de los valores de los datos utilizados para el entrenamiento, pero muy dependiente de la complejidad de las relaciones inherentes en los mismos. Así, podemos disponer de conjuntos de datos de tamaño reducido, que requieren un elevado tiempo de cómputo para llegar a la convergencia del proceso de aprendizaje, y también de conjuntos de datos con un tamaño muestral grande, que sin embargo convergen a una solución rápidamente.
- **El diseño de la arquitectura óptima** de una red que resuelva un determinado problema con éxito, puede llevar mucho tiempo y ser muy complejo. El método habitual es el de ensayo error, por lo que la propuesta de una determinada arquitectura de red no puede aceptarse o descartarse hasta no haber sido entrenada. Los resultados obtenidos con experiencias anteriores, pueden no ser suficientemente significativos para dar indicios del camino a seguir.
- **Las ANN son "entrenadas" y no "programadas"** por lo que es conveniente disponer de una gran cantidad de datos para el proceso de aprendizaje.

- **Las ANN presentan un aspecto complejo y opaco** para el observador externo, que hace que sea muy difícil plantear modificaciones en la estructura de la red, si no es a través de un nuevo entrenamiento que sintetice el nuevo conocimiento. Los cambios que se producen en la red durante el proceso de entrenamiento, no son directamente observables desde el exterior. Neuronas y capas funcionan a modo de "cajas negras".
- **Las ANN son sensibles a la redundancia de los datos de entrada.** Si la ANN se entrena con datos redundantes que no aportan información relevante para la resolución del problema, pueden confundir a la red incrementando considerablemente el tiempo de entrenamiento y reduciendo su efectividad. En estas situaciones, conveniente realizar un análisis previo de los datos de entrenamiento, para eliminar la información redundante o irrelevante que pudieran contener.

2.10. Aplicación de las Redes Neuronales Artificiales en alimentos

Existen dos problemas que tradicionalmente las ANN pueden resolver: los problemas de regresión o de ajuste de datos y los problemas de clasificación, partición o clustering de datos. Las ANN del primer tipo tratan de resolver los problemas de "ajuste de funciones", buscando aquella que permita determinar el valor de un determinado parámetro en función de los valores multivariados introducidos en la red. Ejemplos de este tipo de problemas los tenemos en la predicción de parámetros sensoriales a partir de datos físico-químicos (Hernández-Jiménez et al., 2020; Hernández-Ramos et al., 2020) o de valores de producción, conservación o elaboración a partir de datos del proceso o incluso imágenes del propio producto.

Las ANN del segundo tipo tienen por objetivo asignar los datos introducidos en la red, a una de las clases posibles previamente definidas y ello a partir de un conjunto de atributos o características observadas e inherentes a dichos datos. Estos clasificadores son también conocidos como "reconocedores de patrones". Ejemplos de este tipo serían aquellas redes que permiten el reconocimiento de rostros, formas, colores, patologías, disfunciones o patrones en colecciones de datos multivariados. También dentro de este grupo, tendrían cabida los sistemas que son capaces de "memorizar patrones" y ser capaces de reconocerlos posteriormente, aun siendo introducidos de forma incompleta o distorsionada. Un ejemplo de ello serían los "filtros" capaces de eliminar el ruido de una señal o de reconocer una imagen distorsionada.

En cualquier caso, las ANN no son una herramienta o procedimiento analítico que pueda ser utilizado exclusivamente sobre un producto, sino que son una herramienta auxiliar para el procesamiento y análisis de la información obtenida por medio de otros procedimientos analíticos convencionales, a los que dan apoyo. En este sentido, "las ANN trabajan con datos y no con productos".

Aunque son muchos los campos de utilización de las ANN, en los siguientes apartados se muestra una pequeña parte de la literatura encontrada en la que se describe el uso de las ANN dentro del campo de la alimentación siempre, como se ha dicho, junto a otros procedimientos.

- Análisis de alimentos y control de procesos.

Es amplia la bibliografía en la que se describen usos generalistas de ANN en combinación con otras técnicas analíticas. Estos tratados o manuales aplicados a la Ingeniería Agrícola, el Control de Procesos o la Tecnología de Alimentos, dedican capítulos a la simulación de modelos de sistemas de control de procesos en los que se ha de controlar temperaturas durante el procesamiento térmico (calentamiento o congelación) para predecir parámetros como el contenido de humedad de las salchichas (Mittal et al., 2013), o la identificación de lesiones por frío, cocción, secado, enfriamiento, congelación y almacenamiento de frutas y verduras por medio del análisis con ANN de imágenes hiperespectrales (HSI) y multiespectrales (MSI) (Liu et al., 2017). También hay estudios que tratan de cerrar la brecha entre las características del producto y la percepción y aceptación del consumidor por medio de la ciencia sensorial de los alimentos y el análisis del sabor, procesos clave en el desarrollo de nuevos productos y esenciales para comprender a los consumidores (Yu et al., 2014).

El aprendizaje automático junto con las tecnologías de análisis de big data y la computación de alto rendimiento, crea nuevas oportunidades para la optimización de los sistemas de producción agrícola, la gestión de los cultivos, predicción de rendimientos, detección de situaciones insalubres o el reconocimiento de productos diferenciados, la gestión ganadera en cuanto a las condiciones higiénico-sanitarias o el propio bienestar animal (Liakos et al., 2018).

También son importantes los estudios sobre alimentación en general, que tratan de garantizar la autenticidad de los alimentos detectando la adulteración de los mismos, lo que provoca pérdidas económicas así como la desconfianza de los consumidores. Los métodos cromatográficos, en combinación con la quimiometría, generalmente se aplican en todas las fases de la cadena alimentaria para verificar el origen geográfico,

el método de producción, las tecnologías de procesamiento y la composición de los alimentos, datos que se han de constatar en el etiquetado de los productos. En este sentido son interesantes los estudios realizados con técnicas como la cromatografía, ultravioleta, infrarrojo cercano, infrarrojo medio, y espectroscopía de Raman sobre aceites comestibles, miel, leche y productos lácteos, jugos de frutas, vino y bebidas alcohólicas, productos cárnicos, especias, café, té, alimentos a base de granos, etc; que permiten la clasificación de los productos con técnicas como el análisis discriminante lineal (LDA), el vecino más cercano (k-NN), la analogía de clase por modelado independiente suave (SIMCA), clases dispersas desiguales (UNEQ), red neuronal artificial, máquinas de soporte vectorial (SVM), análisis discriminante por mínimos cuadrados parciales (PLS-DA) y análisis discriminante por proyecciones ortogonales de estructuras latentes (OPLS-DA) (Esteki et al., 2018). Un compendio generalista de todas estas técnicas es desarrollado en las obras de Khadir (2021) y Guiné (2019).

Más específicamente, se han encontrado numerosas referencias sobre el uso conjunto de ANN y técnicas analíticas sobre productos alimenticios concretos. Entre ellas, caben destacar las siguientes.

- Productos cárnicos.

En lo que respecta a los productos cárnicos y con el fin de inspeccionar y evaluar la calidad de los productos cárnicos crudos y procesados, detectando defectos de forma rápida y no invasiva, se han realizado estudios del uso de imágenes hiperespectrales y multiespectrales que han sido procesadas mediante análisis lineales (Regresión por Componente Principal (PCR), Regresión Lineal Múltiple (MLR), Regresión por Mínimos Cuadrados Parciales (PLS)) combinados con análisis no lineales (Red Neuronal Artificial y Máquina de Soporte Vectorial), para tratar de establecer la correlación entre los datos espectrales y las cantidades o concentraciones reales de los productos medidos por ensayos de laboratorio comunes (color, textura, valores microbianos, etc.) (Feng et al., 2018). Más concretamente y para evaluar la calidad de la carne de pollo, se ha empleado un sistema de imágenes hiperespectrales al que se le ha aplicado dos técnicas de reducción de la dimensionalidad, como son el Análisis de Componentes Principales (PCA) y la Optimización de Colonias de Hormigas (ACO), para posteriormente ser procesadas por una red neuronal de tipo BPN (Khulal et al., 2016).

También es importante el uso de las ANN para la detección de sustancias nocivas en alimentos. Un ejemplo lo tenemos en el uso de una red neuronal de tipo BPN entrenada con la regla de aprendizaje de Levenberg-Marquardt, para la detección

del Benzo[a]pireno (BaP), presente en los productos cárnicos procesados y, en particular, en la carne ahumada como es el caso de las salchichas (Chen et al., 2018).

La aplicación de las redes neuronales ha permitido la clasificación de jamones curados, según el tiempo de maduración, a partir de resultados obtenidos por espectros de infrarrojo cercano en el rango de longitud de onda $\lambda=400\text{nm}$ a $\lambda=2500\text{nm}$ (Prevolnik et al., 2014), la diferenciación de carne de cerdo fresca y congelada por medio del uso combinado de huellas dactilares cromatográficas y ANN (Górska-Horczyczak et al., 2017) o la evaluación del contenido de proteínas como métrica de la calidad de la carne de cerdo, a partir de imágenes hiperespectrales procesadas mediante el uso de modelos predictivos basados en una red neuronal de tipo BPN (Ma et al., 2019).

- Pescado.

Las redes neuronales se han usado para clasificar el pescado en tres grupos función de su frescura (Huang et al., 2011). En trabajos posteriores, redes de tipo BP-ANN han sido empleadas para agrupar y predecir el grado de frescura del pescado a partir de datos obtenidos de equipos de visión espacial y registros de espectros NIRS, relacionándolos con el contenido de bases nitrogenadas volátiles, siendo éste el parámetro predicho por la ANN (Huang et al., 2016).

El aceite de pescado es cada vez más popular como suplemento dietético, y para la alimentación animal, debido principalmente a su alto contenido de ácidos grasos omega-3. Por medio de técnicas de espectroscopía (^1H NMR, FT-MIR y FT-NIR) junto con el análisis de los datos obtenidos por medio de ANN y Regresión de Mínimos Cuadrados Parciales es posible no solo la determinación de la calidad del aceite de pescado sino también la reducción de la dimensionalidad de los datos (Giese et al., 2018).

- Productos hortofrutícolas y frutas.

Se ha documentado la clasificación del estado de tomates y mentas a través de la detección de olores por medio de sistemas de nariz electrónica (e-noise), dotadas con sensores de gases basados en SnO_2 , y cuyos se procesaron posteriormente por medio de una ANN después de haberse realizado un análisis de componentes principales (Kasbe et al., 2018)

También y por medio de cromatografía líquida aplicada a la cáscara y pulpa de la fruta de mango, se ha podido detectar la presencia de compuestos fenólicos con

los que se ha podido realizar una clasificación según origen, forma de cultivo, variedad de mango, etc. El uso de las ANN ha permitido reducir la dimensionalidad del problema de forma más eficiente que mediante el uso de otras técnicas basadas en PCA (Silva Sauthier et al., 2019). Un estudio similar aplicado al pimiento rojo y semillas de uva, ha permitido demostrar que el uso de una ANN alimentada con el contenido fenólico de estos alimentos, permite estimar de forma rápida y económica la actividad antioxidante de los mismos (Cerit et al., 2017).

Otro parámetro importante en el caso de la fruta, es el estado de madurez que presenta en un determinado momento. Un ejemplo es el estudio de la fruta a través de imágenes de retrodispersión de luz láser (LLBI- Laser Light Backscattering Imaging) para la predicción de los atributos de calidad de la banana y su posterior clasificación (Adebayo et al., 2017) o el uso de determinadas longitudes de onda en imágenes hiperespectrales, junto con el procesamiento posterior de los datos obtenidos por medio de una ANN, para detectar lesiones por frío manifestadas como deterioro en la textura o la falta de jugo en melocotones (Pan et al., 2016).

El aspecto externo de la piel no sólo importa en la fruta y verduras. También es un factor decisivo para determinar la calidad en el caso de las aceitunas. Con el fin de cuantificar los cambios de color que se producen durante el proceso de endulzamiento, se han propuesto sistemas basados en visión artificial supervisados por medio de redes neuronales, para clasificar las aceitunas amargas y dulces por el color de su piel (Soltanikazemi & Abdanan Mehdizadeh, 2017). En este mismo sentido y empleando el reconocimiento de imágenes de clases cualitativas obtenidas mediante microscopía electrónica de barrido y procesadas por una red de tipo MLP, se ha podido clasificar polvos del jugo de fresa así como aplicar técnicas de análisis de imágenes con la medición de parámetros como color, tamaño de partícula, textura, etc. (Przybył et al., 2018). En otras ocasiones lo que importa es la forma y el tamaño de la pieza de fruta para su clasificación previa a su distribución (Vega Huerta, 2017).

- Bebidas.

En el caso de las bebidas, uno de los factores más importantes es que sean del gusto de los consumidores. Para ello es importante obtener puntuaciones del agrado de las muestras en función de su composición química. Un estudio interesante, en este sentido, es el uso de técnicas híbridas PLS-ANN (Regresión Lineal de Mínimos Cuadrados Parciales junto a una Red Neuronal Artificial)

aplicadas a bebidas de té verde analizadas físico-químicamente y para las que también eran conocidas las puntuaciones sobre su agrado (Yu et al., 2018), o el uso de mapas autoorganizados, como los mapas de Kohonen, para realizar el agrupamiento de bebidas carbonatadas brasileñas de varios sabores y diferentes elaboraciones, en función de los sabores y permitiendo revelar los elementos responsables de la separación, y ello a partir del estudio de las concentraciones de Cu, Fe, Mn, Zn, Ca, K, Na, S, y P (Silva et al., 2019).

También y para el caso de las bebidas, el estudio de compuestos aromáticos volátiles en vinagres chinos mediante la aplicación conjunta de Cromatografía de Gases acoplada a Espectrometría de Masas (GC/MS) y redes neuronales artificiales, ha permitido clasificarlos según el método de fermentación y la región geográfica (Yang Chen et al., 2017).

En lo que respecta a la garantía de que un producto alimenticio cumple con su etiqueta, las bebidas se encuentran entre los alimentos con mayor probabilidad de ser blanco de fraude alimentario, con la mezcla o sustitución parcial o total del producto original con otros similares o de peor calidad. La aplicación de estudios relacionados con la autenticación de bebidas, incluidos los zumos de frutas como la naranja o la manzana, el café, té, vino, brandi, cerveza, whisky, vodka o tequila y otras bebidas alcohólicas, incluyen el uso de técnicas como la separación cromatográfica, la espectrometría de masas, la tecnología de sensores, la espectroscopía de ruptura inducida por láser (LIBS) o la espectroscopía de RMN, que requieren un análisis multivariante posterior. En todos los casos, las redes neuronales se han mostrado como una herramienta poderosa para obtener resultados más confiables, que aquellos que se obtienen por medio de otras técnicas discriminantes (LDA, KNN, PLS-DA, SIMCA). Su uso combinado ha permitido la predicción de los parámetros en estudio para detectar vinos adulterados y evitar la competencia desleal en el mercado o su clasificación según su procedencia geográfica, variedad de uva utilizada y año de cosecha (Kamiloglu, 2019).

En el caso concreto del vino, su calidad suele evaluarse mediante el análisis químico tradicional o mediante un panel sensorial compuesto por expertos entrenados. En los últimos años, esta labor se ha ido desarrollando en base al uso de lenguas electrónicas (e-tongues) junto al uso de redes neuronales para el control de calidad, control del envejecimiento, la detección de fraudes, la determinación de los niveles de compuestos antioxidantes responsables de sus características organolépticas y beneficiosos para la salud, la predicción de las

concentraciones de polifenoles, azúcares, pH u otros compuestos de interés (Rodríguez Méndez et al., 2016) y la clasificación de vinos rosados con Denominación de Origen (Pérez-Magariño et al., 2004).

- Leche y productos lácteos derivados.

La leche es uno de los siete productos alimenticios más adulterados mediante mezclas con diferentes tipos de leche o suero de leche, neutralización para enmascarar la acidez de la leche, adición de melamina, sal o azúcar para encubrir el agua extra o la adición de grasa no láctea. Para cuantificar el grado de adulteración de la leche líquida mediante la adición de suero, se han realizado estudios de viabilidad del uso de la microscopía Raman Confocal junto con ANN (Rocha et al., 2015). El empleo más versátil de narices electrónicas se ha aplicado para detectar el deterioro de la leche, si ha sido pasteurizada o no, su diferenciación según su origen, determinación de parámetros como el contenido de grasa, características de procesamiento (De Saja et al., 2016) u otras funciones como la evaluación de la salud de los animales mediante la predicción del crecimiento del patógeno principal más frecuente de la mastitis de la vaca, siendo la especie predominante en los brotes de intoxicación alimentaria por estafilococos en la leche (*Staphylococcus aureus*), y ello a partir de la toma de datos como la temperatura, pH, velocidad de agitación y concentración celular inicial (Orawan et al., 2016).

Respecto de otros productos lácteos como el helado, uno de los principales usos de las ANN es la determinación del grado de aceptación del producto. Debido a las diferencias en la percepción de los paneles de cata, como consecuencia de la naturaleza incierta de la evaluación sensorial individual de los atributos del producto, se ha estudiado la posibilidad de implementar un sistema adaptativo de inferencia neuro-difusa (ANFIS), para predecir la aceptabilidad general del helado y realizar así cambios en los procesos de elaboración del producto. Como entrada a la red neuronal difusa, se dispusieron los atributos sensoriales obtenidos de datos experimentales de sabor, cuerpo y textura, viscosidad y suavidad. Como salida, el grado de aceptabilidad general (Bahramparvar et al., 2014).

Algo parecido ocurre con el dulce de leche, donde se han realizado evaluaciones sensoriales mediante análisis descriptivo cuantitativo y pruebas de aceptación e intención de compra, empleando para ello ANN junto con otras técnicas, para la determinación de los parámetros utilizados en el tratamiento térmico y los cambios cuantitativos en los ingredientes (Gaze et al., 2015).

También se ha descrito el empleo de narices electrónicas junto a la interpretación posterior con ANN, para determinar el nivel de rancidez de la mantequilla y su diferenciación según la técnica de fabricación o la detección de fraude por medio del aroma en quesos, la evaluación del tipo de leche utilizada, la detección de presencia de mohos o su clasificación de acuerdo con las categorías del mercado (De Saja et al., 2016). En este sentido y también para el queso Gouda, se han realizado estudios para predecir la calidad global para untar, en función de su almacenamiento a diferentes temperaturas (8°C, 20°C y 30°C), comparando las técnicas de regresión lineal múltiple y de la red neuronal artificial (Stangierski et al., 2019). Así mismo, por medio de una ANN y a partir de datos de la composición fisicoquímica de quesos obtenidos tras su maduración durante 12 meses, se pudo realizar la clasificación de los mismos conforme al nivel alcanzado en su recuento de células somáticas (SCC) (Hernández-Ramos et al., 2019).

Otros estudios han permitido determinar la viscosidad de los productos lácteos fermentados como propiedad física importante para el control de muchas operaciones lecheras industriales. Su valor puede informar de efectos del tratamiento térmico, la composición química de la leche cruda, las condiciones de procesamiento y las condiciones de almacenamiento. Mediante el uso de una ANN y a partir de los datos de entrada de grasa láctea, proteína y valores de pH, medidos directamente a partir de la leche cruda de vacas, se ha podido determinar a la salida de la red la predicción de la viscosidad del yogur (Hristova & Ahmad, 2015).

3. Espectroscopía de Infrarrojo Cercano (NIRS)

3.1. Fundamentos

La radiación electromagnética está formada por ondas que se propagan por el espacio a gran velocidad, estando constituida por campos eléctricos y magnéticos perpendiculares entre sí. Cuando una radiación electromagnética monocromática (caracterizada por el valor de su única longitud de onda) incide sobre una muestra, la interacción entre la radiación electromagnética y la muestra puede manifestarse de tres formas: absorción, transmisión y reflexión.

La espectroscopía estudia la interacción materia-radiación electromagnética como función dependiente de la longitud de onda (λ) o de la frecuencia (ν) al estar ambas relacionadas, siendo de interés tanto la absorción como la emisión de energía radiante.

Del espectro electromagnético y para esta tesis, sólo interesará la zona correspondiente a la región del Infrarrojo (IR) y más concretamente la denominada como Infrarrojo Cercano.

La región IR del espectro electromagnético se extiende desde los números de onda ($\tilde{\nu}$) 14.285 cm^{-1} a 10 cm^{-1} , dividiéndose en Infrarrojo Cercano (NIR), Infrarrojo Medio (MIR o simplemente IR) e Infrarrojo Lejano (FIR).

La región del NIR es la comprendida entre los números de onda 14.285 cm^{-1} a 4.000 cm^{-1} o, lo que es lo mismo, entre las $\lambda=700 \text{ nm}$ y $\lambda=2.500 \text{ nm}$. En esta tesis se utilizará, concretamente, la comprendida entre las $\lambda=1.100 \text{ nm}$ a $\lambda=2.000 \text{ nm}$ por ser el rango de trabajo de la sonda de fibra óptica, que se acoplará para realizar la medición de las muestras, tal y como se describirá más adelante. En la Imagen 3-1 se muestra su situación dentro del espectro electromagnético.

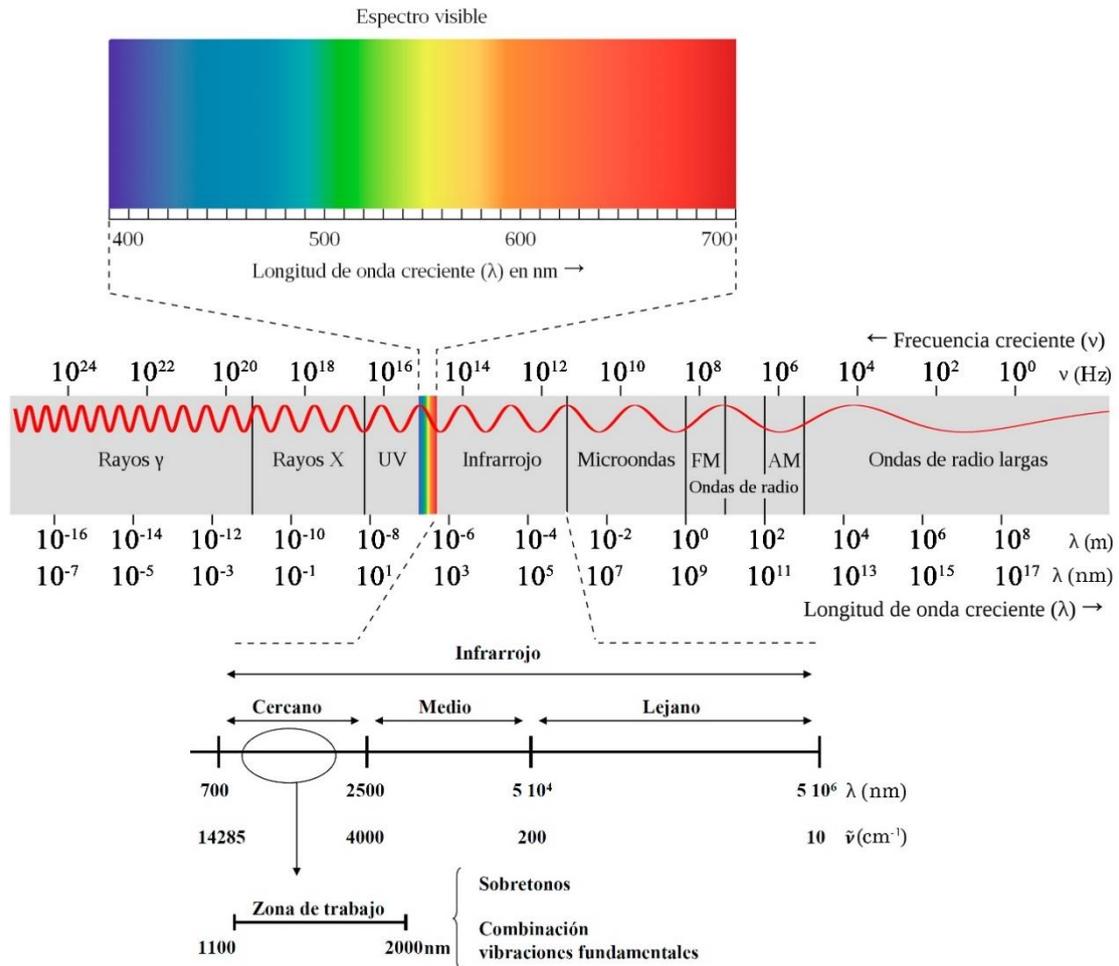


Imagen 3-1: Espectro electromagnético (elaboración propia)

En la región NIR son especialmente interesantes las espectroscopías de absorción/transmitancia, de reflectancia y de transfectancia (Peguero Gutiérrez, 2010). En este trabajo se utilizará la radiación reflejada que es el objeto de la espectroscopía de reflectancia. En la Imagen 3-2, se pueden apreciar los tres fenómenos.

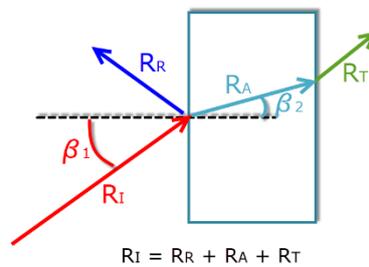


Imagen 3-2: Fenómenos de Absorción, Transmisión y Reflexión
 (R_I : Radiación Incidente, R_R : Radiación Reflejada, R_A : Radiación Absorbida, R_T : Radiación Transmitida)
 (Elaboración propia a partir de Macho Aparicio, 2002)

3.2. Espectroscopía de reflectancia

La espectroscopía de reflectancia aborda el estudio de la radiación reflejada por la superficie de la muestra en estudio, pudiendo ser de dos tipos diferentes: **reflejada especular** y **reflejada difusa**. En condiciones normales, las mediciones de reflectancia que se realicen van a disponer de las dos componentes, pero no con el mismo nivel de significación. Así, mientras la componente especular apenas aporta información sobre la composición de la muestra, la componente difusa aporta la información suficiente para ser la base de las medidas cuantitativas en NIR. Por tanto, las mediciones se realizan intentando minimizar el efecto de la primera componente, que únicamente contribuye al ruido, tratando de mejorar el aporte de la segunda.

Reflectancia especular:

Obedece a las leyes de Fresnel (Beynon, 1988) y predomina cuando el material sobre el que se produce la reflexión, cumple con los siguientes criterios: Tener valores altos de los coeficientes de absorción en la muestra para la longitud de onda incidente, penetración en la muestra muy pequeña en comparación con la longitud de onda incidente y dimensiones de la superficie reflectante mucho mayores que la longitud de onda incidente.

La primera consecuencia es el difuminado de la componente especular de la reflectancia, como consecuencia del efecto del grosor. La mayoría de los materiales, exceptuando los metales, presentan aproximadamente una reflectancia especular del 4% de la radiación incidente, lo que debe ser tenido en cuenta en todas las mediciones por superponerse a la reflectancia difusa.

Reflectancia difusa:

Este tipo de reflectancia predomina cuando para una longitud de onda de la radiación incidente, la superficie sobre la que incide la radiación electromagnética es débilmente absorbente o cuando la penetración de la radiación es grande.

La reflectancia difusa tiene lugar en todas las direcciones sobre la superficie de la muestra como consecuencia de los procesos de absorción y dispersión (o *scattering*). Además, el proceso varía según la forma, tamaño, grado de compactación, etc, de la materia que se encuentra a su paso, siendo la base

de la espectroscopía NIR y de las mediciones cuantitativas que con ella se realizan.

Cuando la radiación incide sobre la superficie de la muestra, se puede considerar que la frontera medio-muestra se compone de distintas pequeñas interfases. En cada una de ellas se produce la reflexión de la radiación siguiendo la ley de Fresnel, pero el efecto global es el de la reflexión de la luz en cualquier ángulo (reflectancia difusa). La radiación que se transmite hacia el interior de la muestra atravesando la primera capa, puede sufrir absorción por lo que su intensidad se verá atenuada según la ley de Lambert-Beer (García Martínez, 2012), difundiéndose a las siguientes capas a través de reflexiones aleatorias, refracciones y dispersiones que darán lugar a nuevas atenuaciones. La trayectoria de cada elemento de radiación no puede describirse matemáticamente, por lo que no existe una teoría rigurosa que explique la complejidad del proceso de reflectancia difusa. Una representación de este efecto puede apreciarse en la Imagen 3-3.

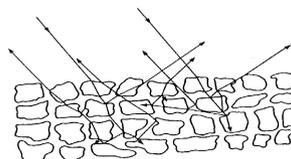


Imagen 3-3: Representación del fenómeno de reflectancia difusa (Hernández Hierro, 2008)

No obstante existen aproximaciones entre las que destaca la propuesta de Kubelka et al. (1931), que explica la reflectancia difusa teniendo en cuenta una capa infinitamente gruesa de una muestra opaca, con una absorción débil e ignorando los efectos de la dispersión anómala. La reflectancia de una capa de las características mencionadas viene dada por la expresión:

$$f(R_{\infty}) = \frac{k}{s} = \frac{(1-R_{\infty})^2}{2R_{\infty}} \quad (3.1)$$

en la que (R_{∞}) es la reflectancia absoluta de la muestra y se define como la fracción de radiación incidente que es reflejada, (k) es el coeficiente de absorción de la muestra y (s) es el coeficiente de dispersión o scattering. Como se puede comprobar, el valor de la reflectancia depende únicamente de la relación (k/s) y no de sus valores absolutos.

Considerando la concentración (C) del analito absorbente de absorptividad (ϵ), la expresión anterior se puede reescribir de la siguiente manera:

$$f(R_{\infty}) = \frac{(1-R_{\infty})^2}{2R_{\infty}} = \frac{k}{s} = \frac{\ln 10 \cdot C \cdot \epsilon}{s} \quad (3.2)$$

En la ecuación (3.2) se requiere conocer el valor de la reflectancia absoluta (R_∞). Sin embargo, en la práctica el valor conocido es el de la reflectancia relativa (R) como relación entre las intensidades de las radiaciones reflejadas por la muestra y por una sustancia patrón estándar.

$$R = \frac{R_{muestra}}{R_{patrón\ estándar}} \quad (3.3)$$

Teniendo en cuenta (3.3), la expresión (3.2) quedaría:

$$f(R) = \frac{(1-R)^2}{2R} = \frac{C}{a} \text{ siendo } a = \frac{s}{2.303 \cdot \epsilon} \quad (3.4)$$

Como se puede apreciar, la relación ($f(R)$) y (C) es lineal y su pendiente es igual a ($1/a$). La relación dejará de ser lineal, cuando la matriz tenga una absorción débil y regular o el analito tenga marcadas bandas de absorción intensas.

Habitualmente y para el caso de NIR, se acepta que la ecuación de Kubelka-Munk y de la ley de Beer son aplicables a bandas débilmente absorbentes. No obstante y debido a que no pueden separarse las absorciones del analito y de la matriz, por absorber fuertemente a la misma longitud de onda, se producen desviaciones de la ecuación de Kubelka-Munk. En la práctica, se aplica una relación alternativa y análoga a la ley de Beer, en la que (R) es la reflectancia relativa, (a') es una constante y (A) es la absorbancia aparente.

$$A = \log \frac{1}{R} = a' \cdot C \quad (3.5)$$

A pesar de que esta relación no tiene bases teóricas consolidadas, proporciona resultados muy satisfactorios al emplearse bajo las condiciones habituales de la espectrofotometría de reflectancia difusa.

3.3. Interpretación de los espectros en la región NIR

Cuando una radiación electromagnética incide sobre la materia y para que se produzca el fenómeno de absorción, la energía del fotón incidente debe tener la energía precisa para que se satisfaga la condición del paso de un nivel energético al siguiente, puesto que los niveles energéticos se encuentran cuantizados (Imagen 3-4). Además, debe producirse el acoplamiento radiación-materia por lo que la molécula absorbente debe experimentar un cambio neto en el momento dipolar, siendo la razón por la que moléculas monoatómicas y homonucleares, como He, Ne, O₂, N₂ o Cl₂, no absorben en el infrarrojo cercano. Por otro lado, la rotación está muy

restringida en los sólidos y en los líquidos, por lo que para este tipo de muestras sólo tienen interés los picos vibracionales.

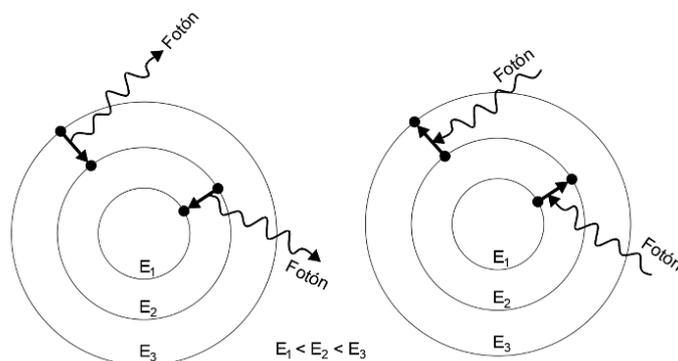


Imagen 3-4: Cuantificación energética (elaboración propia)

Al producirse un cambio energético (ΔE), éste será función de la frecuencia de vibración (ν) y de la constante de Plank (h):

$$\Delta E = h \cdot \nu \quad (3.6)$$

La frecuencia de vibración puede expresarse, a su vez, como:

$$\nu = \frac{1}{2 \cdot \pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (3.7)$$

en la que (k) es una constante de proporcionalidad característica de los enlaces químicos y (μ) es la masa reducida de los átomos de masas m_1 y m_2 implicados en el enlace. La masa reducida se obtiene:

$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2} \quad (3.8)$$

Según los principios de la mecánica cuántica, los osciladores cuánticos sólo pueden tener aquellos valores energéticos que satisfagan la relación:

$$E = \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \cdot h \cdot \nu \quad (3.9)$$

donde (ν) es el número cuántico vibracional que únicamente puede tomar valores enteros: 0, 1, 2, 3... Sustituyendo según (3.7) quedaría:

$$E = \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \cdot \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (3.10)$$

Por lo tanto y asignando valores consecutivos a (ν) tendríamos los valores energéticos adyacentes correspondientes a dos niveles:

$$\text{Para } \nu = 0 \Rightarrow E_0 = \frac{1}{2} \cdot \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (3.11)$$

$$\text{Para } \nu = 1 \Rightarrow E_1 = \frac{3}{2} \cdot \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

La diferencia energética entre ambos será:

$$\Delta E = E_1 - E_0 = \frac{h}{2 \cdot \pi} \cdot \sqrt{\frac{k}{\mu}} = h \cdot \nu \quad (3.12)$$

Ahora bien, las reglas de selección indican que las transiciones permitidas son las correspondientes a cambios unitarios del valor del número cuántico vibracional ($\Delta \nu = \pm 1$). Como los niveles vibracionales están equiespaciados, una vibración molecular producida por una radiación de una determinada longitud de onda, sería observada con un pico de absorción.

No obstante y aun siendo elásticos, los enlaces moleculares reales no tienen el comportamiento de un oscilador armónico. Cuando dos átomos se aproximan como consecuencia de la vibración, la fuerza de repulsión coulombica entre sus núcleos tiene la misma dirección y sentido que la fuerza que tiende a restaurar el enlace, lo que hace esperar que la energía potencial se eleve con más rapidez que la predicha por la teoría del oscilador armónico. De igual forma y cuando los átomos están muy distanciados, se puede originar la disociación de la molécula como consecuencia de la reducción de la fuerza restauradora del enlace y de su energía potencial. Por ello se toma el modelo del oscilador anarmónico cuya energía viene dada por la siguiente expresión:

$$E = \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \cdot h \cdot \nu - \left(\nu + \frac{1}{2}\right)^2 \cdot h \cdot \nu \cdot x - \left(\nu + \frac{1}{2}\right)^3 \cdot h \cdot \nu \cdot x' - \dots \quad (3.13)$$

donde (x) y (x') son constantes de anarmonicidad, con valor pequeño y positivo y cuya magnitud decrece. Puede observarse que el incremento de (ν) genera ΔE cada vez más pequeños, por lo que llegado el punto los términos pueden ser ignorados.

En el modelo anarmónico, los niveles energéticos no están igualmente espaciados: a mayor nivel de energía, la energía entre niveles es menor. Otra consecuencia de la anarmonicidad es el cambio en la regla de selección, ya que ahora pueden observarse transiciones con $\Delta \nu = \pm 2, \pm 3, \dots$ etc, cuyas bandas se denominan sobretonos,

además de la ya existente transición en la banda fundamental con $\Delta \nu = \pm 1$. (Imagen 3-5).

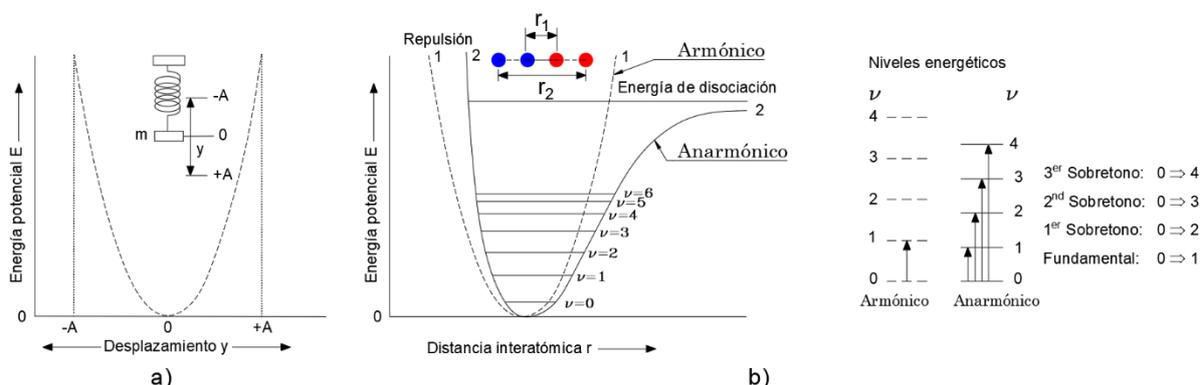


Imagen 3-5: a) Curva Energía potencial oscilador armónico
 b) Curva Energía potencial oscilador anarmónico según niveles energéticos
 (elaboración propia a partir de (Hernández Hierro, 2008; Vicente Hinestroza et al., 2014))

Las frecuencias de los sobretonos ocurren en la región comprendida entre los números de onda $\tilde{\nu} = 4.000 \text{ cm}^{-1}$ y $\tilde{\nu} = 14.300 \text{ cm}^{-1}$. Además de los sobretonos, es posible la existencia de bandas de combinación, cuyas frecuencias son combinaciones lineales de las frecuencias fundamentales, y que son el resultado de la interacción de vibraciones diferentes. Por ejemplo:

$$\nu_{comb} = n_1 \cdot \nu_1 \pm n_2 \cdot \nu_2 \pm \dots \quad (3.14)$$

donde n_1, n_2, \dots son números enteros y ν_1, ν_2, \dots las frecuencias de las transiciones que contribuyen a la banda de combinación.

Los enlaces que implican átomos de hidrógeno vibran con una gran amplitud cuando sufren tensión, lo que produce una apreciable desviación de la armonicidad. Esta es la razón por la que la mayor parte de las bandas de absorción que se observan en las gráficas NIR, proceden de bandas de sobretonos y de bandas de combinación de vibraciones fundamentales que se producen en la región del MIR, donde están implicados grupos H~átomo o combinaciones de vibraciones de tensión o flexión de tales grupos.

En el estudio de los espectros IR de muestras sólidas o líquidas, sólo es necesario considerar los movimientos vibracionales. Ello se debe a que la energía necesaria para provocar un cambio en estados rotacionales, es mucho menor que para estados vibracionales, por lo que las bandas de absorción rotacional solo pueden ser observadas en los gases.

Las transiciones entre niveles energéticos vibracionales, observables como bandas tanto en el NIR como en el MIR, originan un cambio en el momento dipolar de la molécula. La magnitud de dicho cambio, junto con la variación de la anarmonicidad en el enlace, hacen crecer tanto las intensidades de los sobretonos como las de las bandas de combinación en el NIR. Es por ello que las vibraciones que implican átomos de hidrógeno son más intensas que aquellas en las que participan otros átomos. La baja masa atómica y las elevadas constantes de fuerza de los enlaces con el hidrógeno, son responsables de que las vibraciones fundamentales del mismo aparezcan a altas frecuencias y, consecuentemente, los primeros sobretonos aparezcan en la región NIR. En la región NIR, las transiciones corresponden a sobretonos y bandas de combinación, en la región MIR a vibraciones fundamentales y en la región FIR a rotaciones

En la Imagen 3-6 podemos ver un espectro típico de la región NIR según lo comentado en los párrafos previos. En la misma se aprecia que las bandas de combinación presentan intensidades más elevadas que las correspondientes a las bandas de los sobretonos y que las intensidades de éstas últimas disminuyen según crece el número de tono en un factor de 10 aproximadamente.

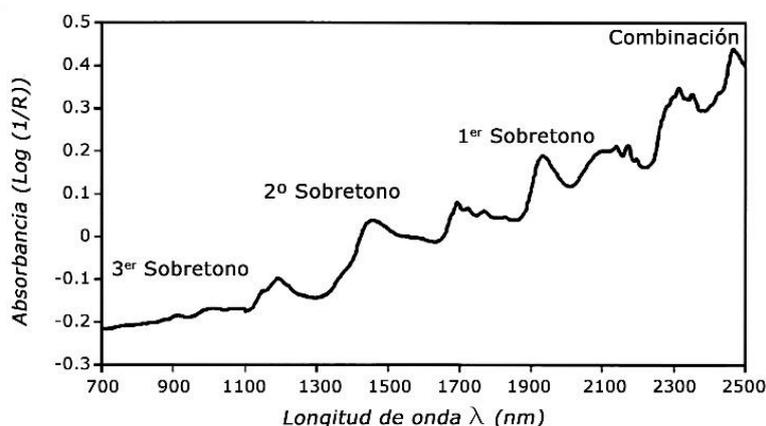


Imagen 3-6: Espectro NIR
(Elaboración propia a partir de (Hernández Hierro, 2008))

Los grupos funcionales más importantes que presentan absorciones en la zona del espectro NIR son:

- Las bandas de alargamiento de los grupos O-H, N-H, S-H, y P-H, tienen absorciones fuertes en la región NIR, debido a la anarmonicidad del enlace como consecuencia de la diferencia de los pesos moleculares de los átomos constituyentes (Peguro Gutiérrez, 2010). Por el contrario, las bandas de los grupos C=O, C-C, C-F, y C-Cl son muy débiles o no aparecen en dicha región.

- La extensión de grupos R-H o tensión/flexión de los mismos, forma la mayor parte de las bandas NIR.

Las bandas del NIR son muy anchas por lo que los espectros suelen aparecer solapados frecuentemente, siendo la razón por la que no sea habitual realizar la correspondencia entre las longitudes de onda y los espectros de las moléculas afines. En la Imagen 3-7 aparece la asignación de bandas de los principales grupos funcionales.

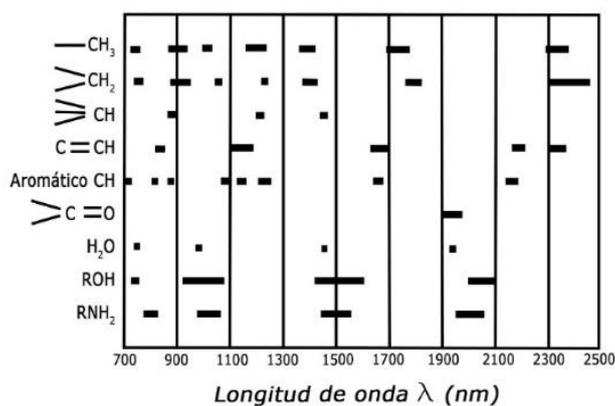


Imagen 3-7: Bandas de grupos funcionales en la región NIR
(Elaboración propia a partir de (Hernández Hierro, 2008))

En el análisis de cualquier sustancia, y en especial de alimentos frescos o que presenten una importante cantidad de humedad, hay que tener en cuenta la absorción que genera la molécula de agua, pudiendo interferir en la señal y, consecuentemente, en las mediciones sobre la muestra. Las longitudes de onda en las que se produce la absorción de la radiación por el agua, son conocidas y se muestran en la Tabla 3-1.

Tabla 3-1: Características de absorción NIR del agua (Hernández Hierro, 2008)

$\lambda(\eta\text{m})$	Absorción Molar ($\text{L}\cdot\text{mol}^{-1}\text{ cm}^{-1}$)	Banda
760	$4.69\cdot 10^{-4}$	3 ^{er} Sobretono
970	$8.31\cdot 10^{-3}$	2 ^o Sobretono
1190	$1.90\cdot 10^{-2}$	Combinación
1450	0.469	1 ^{er} Sobretono
1940	2.06	Combinación

En la Tabla 3-1 se puede observar la intensa absorción molar que se produce en las bandas correspondientes a las longitudes de onda $\lambda=1940$ nm y $\lambda=1450$ nm del espectro en la región NIR, lo que no es beneficioso al poderse enmascarar las absorciones de otros analitos presentes en la muestra como consecuencia de la saturación de los detectores. Es especialmente interesante en la determinación de iones metálicos, pues nos permite su determinación al formar complejos con el agua. (Murray, 2004).

3.4. El instrumento

Un equipo NIRS está compuesto, básicamente, por el sistema óptico y el módulo de muestra como elementos físicos. A su vez, el sistema óptico puede descomponerse en la *fente de radiación*, *redes holográficas*, *filtros* y *selector de longitudes de onda* para la emisión monocromática. El módulo de muestra se descompone en el propio *compartimento para alojar la muestra* en estudio y el *detector de la reflectancia*. En este trabajo, se ha empleado el equipo NIRSystem 5000. Además de lo anterior, hay que disponer del *software* necesario para procesar y tratar los resultados obtenidos, que en este caso fue el software WinISI versión 1.50.

En esta tesis, como se ha indicado antes, se miden los espectros generados por espectroscopía de reflectancia, y más concretamente aquella que utiliza una sonda de fibra óptica acoplada como módulo para la muestra. En la Imagen 3-8 se muestra un esquema con los componentes más importantes.

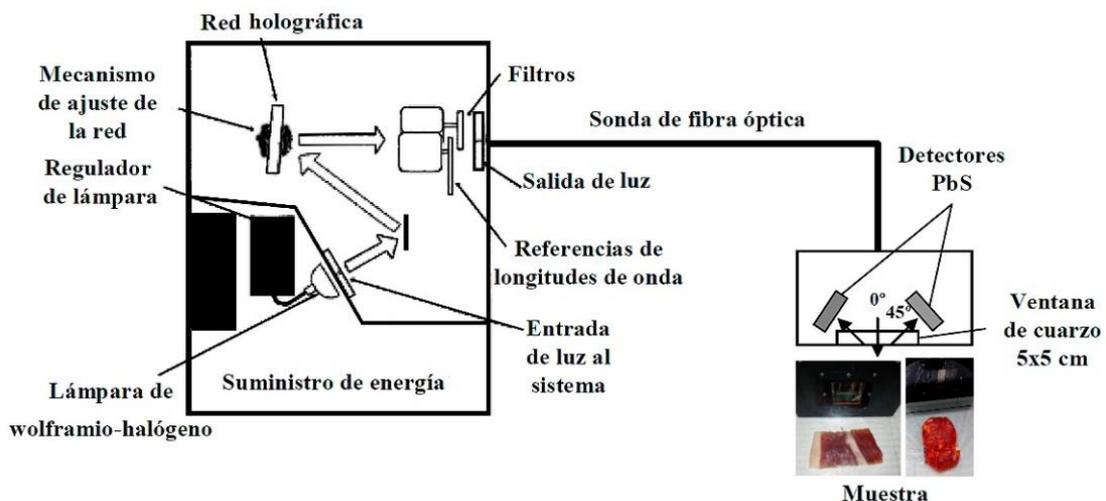


Imagen 3-8: Equipo NIRS con sonda de fibra óptica acoplada
(Elaboración propia a partir de (Hernández Hierro, 2008))

Fuente de radiación:

Es un dispositivo capaz de generar el haz de luz necesario para irradiar la muestra. La fuente de radiación más usada es la lámpara halógena de filamento de tungsteno con ventana de cuarzo, capaz de proporcionar un espectro continuo en la región comprendida entre $\lambda=320$ nm a $\lambda=2500$ nm. Otras fuentes de radiación que pueden utilizarse son los denominados LED's (Light Emiting Diodes), que pueden llegar a emitir radiaciones hasta una $\lambda=1600$ nm en función de su composición constructiva. Las lámparas halógenas requieren un sistema de selección de longitudes de onda, que no es necesario en el caso de los LED's por ser estas fuentes de luz monocromática.

Redes holográficas:

Disponer de un sistema adecuado de selección de longitudes de onda es un factor importante para poder obtener un buen nivel de sensibilidad. Un buen sistema de selección de longitudes de onda debe ser capaz de proporcionar un ancho de banda preciso y exacto para la longitud de onda analítica y señales altas a fin de conseguir una relación señal/ruido que sea satisfactoria. A través de un espejo, el haz de luz se dirige a una red holográfica cóncava que dispersa la luz blanca incoherente en longitudes de onda individuales, transformándola en luz coherente de la misma frecuencia, amplitud y fase o una diferencia constante de ésta. El movimiento de la red modificará el ángulo de posición respecto al haz incidente, lo que permite recorrer todo el espectro NIR. Este tipo de sistema para la selección de la longitud de onda específica, se encuadra dentro de los sistemas dispersivos.

Filtros:

La red holográfica proporciona un espectro en el que aparecen, junto a las líneas de primer orden que son las que presentan mayor intensidad, otras líneas de órdenes superiores que deben ser eliminadas mediante filtros. Estos filtros han de moverse de forma sincronizada con la red holográfica.

Referencia de longitudes de onda:

La calibración de las longitudes de onda se realiza por medida respecto a un estándar interno. Hay dos referencias: para el rango desde $\lambda=400$ nm a $\lambda=1100$ nm se utiliza el didimio mientras que para las $\lambda=1100$ nm a $\lambda=2000$ nm se utiliza el poliestireno. La precisión de la longitud de onda se establece

en los picos: $\lambda=1143.63$ nm, $\lambda=1680.90$ nm, $\lambda=2166.72$ nm y $\lambda=2306.10$ nm. Al utilizar una sonda de fibra óptica, el último pico observado ($\lambda=2306.10$ nm) no se utilizará debido a que la señal es débil como consecuencia de la atenuación producida por la fibra óptica.

Detectores de reflectancia:

Los detectores más habituales utilizados en espectroscopía NIR están contruidos con semiconductores como InGaAs, PbS, InAs, InSb, Si.... El detector más ampliamente utilizado es el de PbS, que posee sensibilidad adecuada entre $\lambda=900$ nm y $\lambda=2600$ nm. Son los dispositivos encargados de recibir la radiación de dispersión difusa procedente de la superficie de la muestra. En el caso de la sonda de fibra óptica se dispone de 4 detectores de PbS, que se orientan formando un ángulo de 45° respecto de la superficie de la muestra.

Sonda de fibra óptica de reflectancia remota:

Es un dispositivo que permite llevar directamente la radiación incidente sobre la superficie de la muestra. La sonda tiene una ventana de cuarzo de 5cm x 5cm de superficie y en su interior se encuentra el detector de reflectancia que usa una placa cerámica como referencia. La sonda se une al equipo mediante un cable de fibra óptica de 1.5 metros de longitud (Imagen 3-9). El uso de este tipo de sondas presenta, como inconveniente, una reducción del rango espectral que es posible utilizar ($\lambda=1100-2000$ nm). Por encima de estas longitudes de onda se produce una significativa reducción de la señal que se debe, fundamentalmente, a la fuerte absorción de la radiación por parte de grupos -OH presentes en la propia fibra óptica.



Imagen 3-9: Sonda de fibra óptica acoplada al equipo NIRS

Software:

Para la adquisición de los datos procedentes del equipo NIRSystem 5000 y el posterior tratamiento de los mismos, se ha empleado el software WinISI en

su versión 1.50, instalado y ejecutándose sobre un PC Hewlett Packard con procesador Pentium III.

3.5. Estandarización del equipo NIR

Como paso previo necesario antes del registro de las muestras, el equipo NIR debe ser estandarizado. Para esta tesis, los datos se obtuvieron a partir de los registros realizados con una sonda de fibra óptica de reflectancia remota, por lo que el proceso que se describe se corresponde, únicamente, a la estandarización para este modo de medición. Consta de los siguientes pasos:

Test de diagnóstico:

Evalúa la respuesta del instrumento, así como la precisión de la longitud de onda y la cantidad de ruido generado.

Respuesta del instrumento:

Mediante este test se comprueba la medida de reflectancia absoluta observada sobre un plato de cerámica (conocido como cerámica de Coors) de un 80% de reflectividad.

Precisión de la longitud de onda:

Se comprueba la correcta alineación de la longitud de onda generada por el instrumento, a partir de la medida de referencia con poliestireno: a las $\lambda=1143.63$ nm, $\lambda=1680.90$ nm y $\lambda=2166.72$ nm. En la Imagen 3-10 se muestra el gráfico en el que se observan los picos máximos de absorbancia para el poliestireno utilizado.

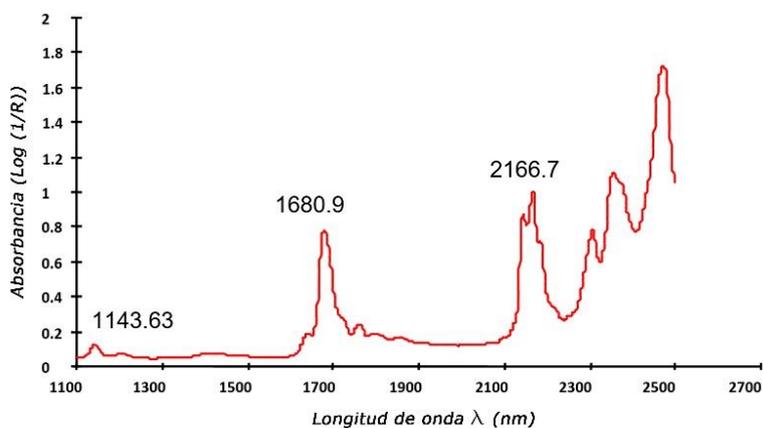


Imagen 3-10: Máximas absorbancias para el poliestireno de referencia

Ruido:

Suministra una medida de la precisión del dato óptico a cada longitud de onda. El ruido fotométrico es medido por escaneado (32 barridos) del material de referencia dos veces, primero como referencia y luego como muestra, hallando la diferencia. El test se repite 20 veces consecutivas y el resultado se da como media. Con el espectro ruido se pueden identificar problemas de lámpara, temperatura ambiente, variaciones de humedad y problemas mecánicos del sistema

En la Imagen 3-11 se muestra un ejemplo de este tipo de test.

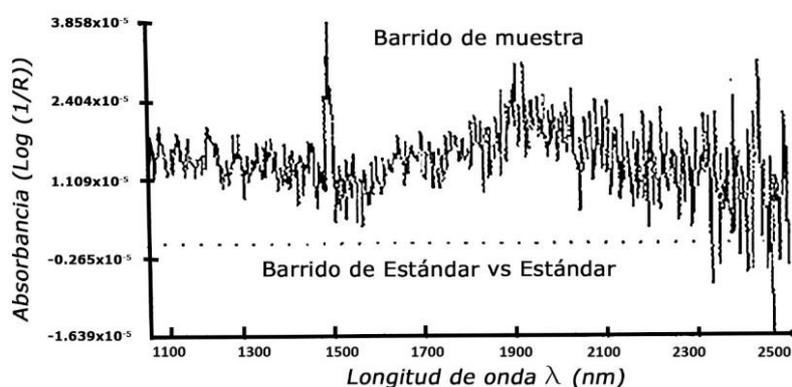


Imagen 3-11: Espectro de ruido. Instrucciones WinISI

3.6. Quimiometría

La quimiometría es una disciplina que agrupa herramientas basadas en las matemáticas, la estadística y la lógica formal (Massart et al., 1997). En la espectroscopía NIR se obtiene una señal de conjunto, no diferenciada, que contiene toda la información físico-química de la muestra.

En función del tipo de respuesta que se necesite obtener, categórica o de escala, los métodos a aplicar se pueden dividir en cualitativos o cuantitativos.

Para el caso de los métodos cualitativos, hay que distinguir entre aquellos en los que no se conoce a priori el número de categorías (métodos de clustering), de aquellos en los que son conocidas las categorías posibles (métodos de clasificación).

Para el caso de los métodos cuantitativos, éstos a su vez se pueden dividir en univariantes, si se centran en el estudio de una única variable, o multivariantes en el caso de intervenir más de una variable. En la espectroscopía NIR y al ser éste un método multiparamétrico, se utilizan mayoritariamente los métodos multivariantes.

Los modelos lineales suelen ser los más empleados y entre ellos cabe distinguir la regresión lineal múltiple (MLR), cuando se trabaja con todas las variables originales, o las regresiones por componentes principales (PCR de Principal Components Regression), por mínimos cuadrados parciales (PLS de Partial Least Squares) o por mínimos cuadrados parciales modificados (MPLS de Modified Partial Least Squares) cuando se ha reducido la dimensionalidad inicial del problema. (Vandeginste et al., 1998; Brereton, 2003)

A continuación, se enumeran otras técnicas quimiométricas que también se emplean en la calibración de estudios basados en NIRS (se portan sus siglas en inglés) (Gaitán Jurado, 2010):

- Regresión por Mínimos Cuadrados Ordinaria (OLS)
- Regresión Contraída (RR)
- Regresión de Raíces Latentes (LRR)
- Regresión Continua (CR)
- Regresión Local Ponderada (WLR)
- Regresión mediante Redes Neuronales Artificiales

En este trabajo, se han utilizado fundamentalmente MPLS y ANN (como herramienta para el tratamiento de información multivariante no lineal). Aunque las ANN utilizadas han tomado los datos NIRS sin ningún tipo de tratamiento, sí son necesarios para otras técnicas quimiométricas. Éstos se describen de manera resumida:

3.6.1. Pretratamientos espectrales

Una vez obtenidos los espectros NIR de las muestras seleccionadas, puede ser necesario aplicar un pretratamiento espectral que permita aumentar la relación señal/ruido, aumentando la señal correspondiente al analito de interés. No todos los pretratamientos consiguen ambos objetivos simultáneamente, por lo que la selección del más apropiado es puramente experimental. Los más utilizados son:

Promediado de espectros:

Reduce el ruido espectral (aleatorio) aumentando la relación señal/ruido.

Corrección del efecto multiplicativo de la dispersión (MSC de Multiplicative Scatter Correction):

Los efectos de la dispersión de la luz pueden ser aditivos o multiplicativos, lo que puede alterar a la relación del espectro obtenido con las propiedades

químicas de la muestra a analizar. Este tratamiento trata de evitar que los efectos de la dispersión anulen o se superpongan a los debidos a las propiedades químicas del analito cuya presencia se desea estudiar.

Esta corrección minimiza las diferencias entre los espectros, mejorando la linealidad de cada uno de ellos y conservando la información química inherente (Martens et al., 1983; Geladi et al., 1985; Fernández-Cabanás et al., 2007).

Tipificación de la absorbancia SNV (Standard Normal Variate):

Este tratamiento es similar al anterior, en cuanto a que ambos tratan de reducir el efecto de la dispersión (*scattering*). En este caso ayuda a corregir las diferencias en el tamaño de las partículas sólidas. SNV y MSC están relacionados linealmente haciendo que los resultados sean similares.

La aplicación de esta corrección requiere el cálculo previo del valor medio y la desviación estándar de los valores de las absorbancias ($\text{Log}(I/R)$) para todas las longitudes de onda de cada *i*-espectro. Los nuevos datos corregidos, para cada *i*-espectro, se obtienen aplicando la siguiente relación sobre cada dato a todas las longitudes de onda de cada *i*-espectro:

$$X_{\text{Log}(1/R),i\text{SNV}} = \frac{X_{\text{Log}(1/R),i} - \bar{X}_{\text{Log}(1/R),i}}{\sigma_{\text{Log}(1/R),i}} \quad (3.15)$$

Donde para cada *i*-espectro

$\bar{X}_{\text{Log}(1/R),i}$ representa el valor medio de los valores de absorbancia a todas las longitudes de onda de cada *i*-espectro

$\sigma_{\text{Log}(1/R),i}$ representa la desviación estándar de los valores de absorbancia a todas las longitudes de onda de cada *i*-espectro

Corrección de la tendencia DT (Detrend):

Esta corrección tiene por finalidad reducir la curvatura de la línea base que se produce como consecuencia de los tamaños diferentes de las partículas, así como de los diferentes grados de compactación y humedad. Cada espectro se ajusta, mediante mínimos cuadrados, a una función cuadrática en la que la variable dependiente es el dato a cada longitud de onda $X_{\text{Log}(1/R),i}$ para cada *i*-espectro, mientras que las variables independientes son cada una de las longitudes de onda (*W*). De esta manera obtendremos los coeficientes *A*, *B* y

C y el término residual e_i , con lo que se puede calcular los valores de cada i-espectro $\hat{X}_{Log(1/R),i}$ y para cada longitud de onda según la siguiente expresión:

$$\hat{X}_{Log(1/R),i} = A + B \cdot W + C \cdot W^2 + e_i \quad (3.16)$$

El valor corregido se obtiene calculando la diferencia entre el dato original y el valor calculado en el paso anterior (3.16):

$$X_{Log(1/R),iDT} = X_{Log(1/R),i} - \hat{X}_{Log(1/R),i} \quad (3.17)$$

Derivadas:

La baja diferenciación que presentan los espectros NIR puede mejorarse derivando los espectros. Esto permite aumentar las diferencias entre las bandas anchas y solapadas del espectro. La primera derivada elimina los desplazamientos de línea base, mientras que la segunda derivada elimina los términos que varían linealmente con la longitud de onda.

Previo al cálculo de las derivadas, se puede realizar un "suavizado" del espectro, que permiten minimizar el ruido espectral (que se expresa como cambios bruscos en la amplitud de la señal).

En la imagen 3-12, se observa el cambio en los espectros con la 2ª derivada

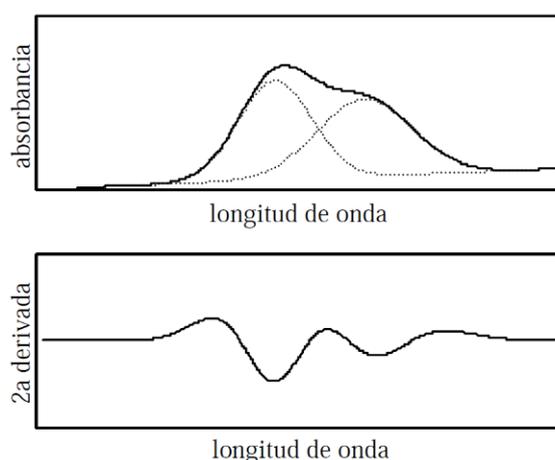


Imagen 3-12: Espectro con 2 bandas solapadas y resolución con la 2ª derivada (Macho Aparicio, 2002)

Habitualmente se descarta el cálculo de derivadas de mayor orden, pues añaden más ruido al espectro (Norris & Williams, 1984).

La notación que representa estos pretratamientos se indica mediante 4 dígitos como (a, b, c, d), siendo a, el orden de derivada, b, el número de puntos en

los cuales se realiza la derivada, c el número de puntos en los cuales se realiza el primer suavizado y d, el número de puntos en los cuales se realiza el segundo suavizado.

La combinación de los pretratamientos Standard MSC, SNV y DT, con la aplicación posterior de derivadas y suavizados, son los recursos con los que se intenta eliminar, o al menos reducir, aquellos efectos que se superponen a la señal NIR, enmascarando los datos que se buscan para el propósito analítico (Begley et al., 1984). (Imagen 3-13).

Se destaca de nuevo, que para la calibración con ANN no se ha realizado ningún tratamiento previo a los datos de los espectros NIR, aunque no se descarta su aplicación en el futuro.

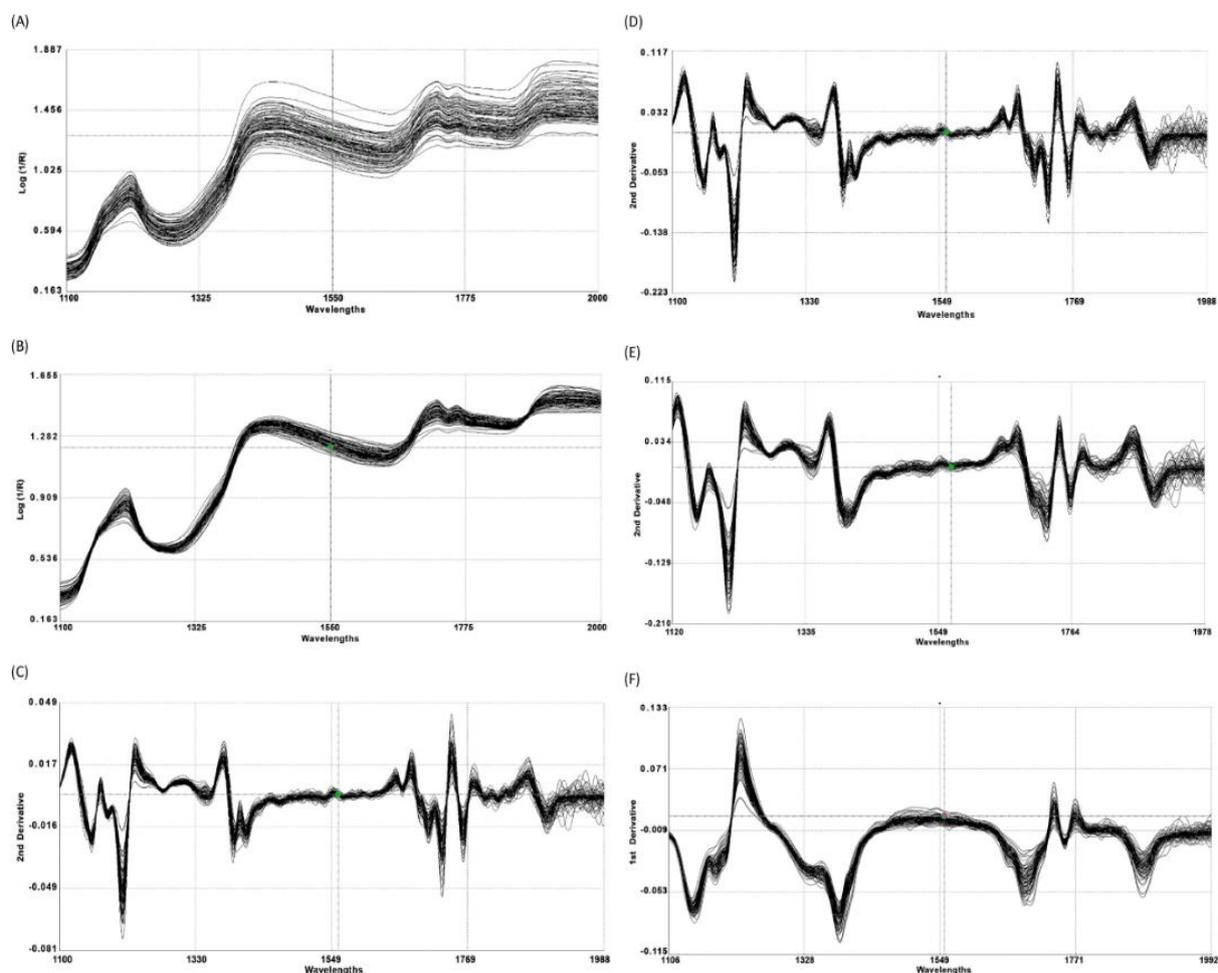


Imagen 3-13: Espectros de muestras y combinaciones de tratamientos sobre los espectros.
 (A) Sin tratamiento (original). (B) MSC Estándar. (C) Sin tratamiento con 2,4,4,1.
 (D) SNV con 2,4,4,1. (E) MSC Estándar con 2,8,6,1. (F) Detrend con 1,4,4,1
 (Elaboración propia)

3.6.2. Análisis de Componentes Principales (PCA)

El análisis de componentes principales es uno de los métodos de reducción de variables más utilizado ya que permite condensar, sin pérdidas relevantes, el gran volumen de información que proporcionan los datos espectroscópicos a la vez que elimina la correlación espectral. Si llamamos X a la matriz de datos, donde cada fila corresponde al espectro de cada muestra m y cada columna a la absorbancia a una longitud de onda k , matemáticamente las m muestras representan puntos en el espacio de dimensión k . Normalmente se dispone de un número elevado de muestras m y de un número elevado de longitudes de onda k . Con lo que la matriz X está formada por $m \times k$ valores de absorbancia.

El objetivo del PCA es reducir la dimensionalidad de la matriz X calculando un número inferior de nuevos ejes que expliquen la información original. Estos nuevos ejes se llaman Componentes Principales (PC de Principal Components). La característica principal de los PC's es que el primero recoge la máxima variabilidad del conjunto de muestras, el segundo recoge una variabilidad inferior al primero y es ortogonal a éste y así sucesivamente hasta que se explica la máxima información relevante.

En la Imagen 3-14 se muestra un grupo de muestras en sus ejes originales y en las nuevas PC. La matriz de datos X se descompone en el producto de 2 matrices: una de scores (puntuaciones o valores representativos de las relaciones entre las muestras, que son las coordenadas sobre estos nuevos ejes) y otra de loadings (valores o pesos que representan la relación existente entre las variables).

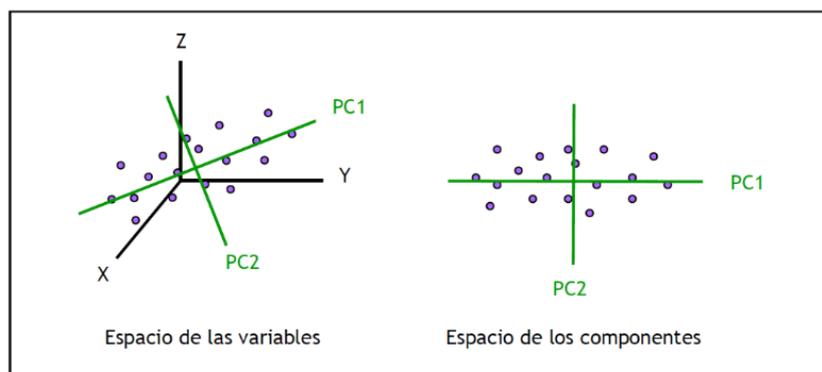


Imagen 3-14: Representación gráfica de la reducción de la dimensionalidad de un sistema de 3 variables, a otro con 2 componentes principales por medio de PCA. (Peguero Gutiérrez, 2010)

Representando algebraicamente lo expresado anteriormente, tendríamos que:

$$\text{Espectro}_{\text{muestra}} = \text{score}_1 \cdot \text{loading}_1 + \text{score}_2 \cdot \text{loading}_2 + \dots + \text{ruido}_{\text{espectral}} \quad (3.18)$$

Lo más importante y fundamental en un PCA es la elección del número de componentes principales que contienen la información relevante del sistema en estudio. Se han descrito diferentes procedimientos para la estimación del número de componentes principales significativos. El más habitual es representar la varianza explicada (o varianza residual) en función del número de PC's y escoger el número mínimo para el cual no se encuentra mejora significativa. En cualquier caso, el número de componentes escogido debe tener sentido químico y ser coherente con lo que se observa en el gráfico.

La detección de espectros atípicos que pudieran estar fuera de la población, o comúnmente llamados "outliers", se realiza en base a medir la distancia Mahalanobis (H) entre el espectro de una muestra y la media espectral del conjunto de muestras. Para el caso de esta tesis, aquellos espectros cuya distancia $H > 2.7$ se desechan.

En la Imagen 3-15 se muestra un esquema de los pasos seguidos para la realización de un análisis de componentes principales después de la aplicación de diferentes pretratamientos. Dichos pasos contemplan la elección del número de componentes principales, la construcción del nuevo sistema de coordenadas espectral, la detección de outliers y el resultado de eliminar los anteriores del conjunto de datos espectrales originales.

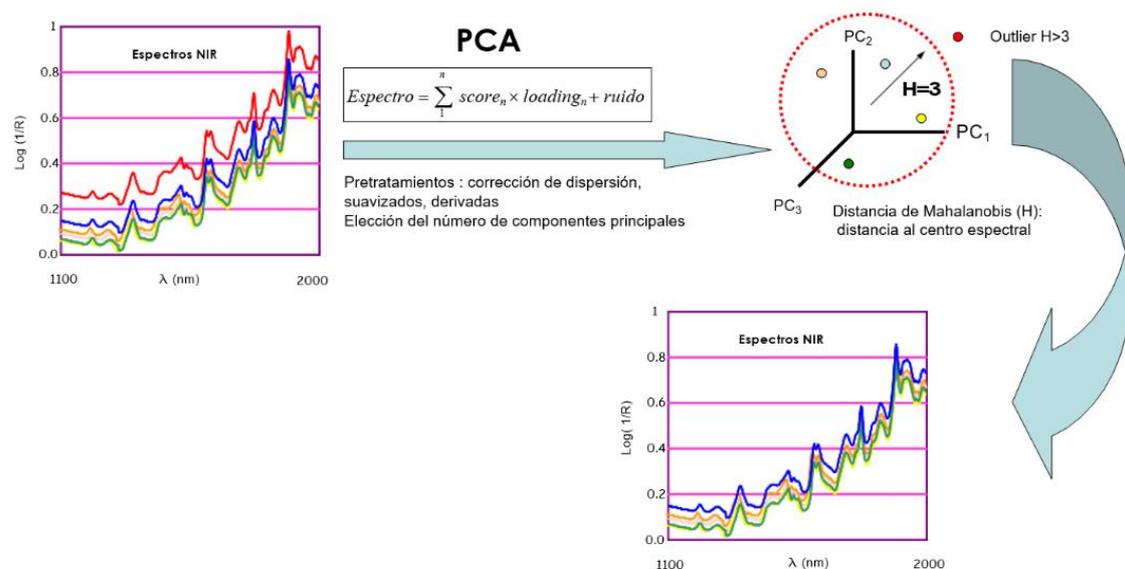


Imagen 3-15: Análisis de Componentes Principales (Hernández Hierro, 2008)

3.6.3. Regresión por Mínimos Cuadrados Parciales Modificados (MPLS).

La Regresión por Mínimos Cuadrados Parciales Modificados es un método cuantitativo, en el que previamente se ha realizado una reducción de variables basándose en un PCA. De este modo, se consigue condensar la información inicial en un número de variables inferior al original. El proceso de regresión se realiza con el nuevo conjunto de variables, simplificando tanto el modelo de calibración como la interpretación de los resultados (Brereton, 1992).

El método MPLS es una variante del método PLS, introducido en 1975 como modificación del algoritmo NIPALS (Non-linear Iterative PARTial Least Squares) para la obtención de componentes principales (Wold, 1975; Miyashita et al., 1990). Este método es útil en aquellos problemas de calibración que presentan una alta dimensionalidad con un bajo muestreo, lo que suele ser habitual en los procesos analíticos con espectroscopía NIR, obteniéndose un número de variables de trabajo menor que el original. Las nuevas variables son combinación lineal de las originales y reciben el nombre de componentes, variables latentes o factores.

El algoritmo PLS se utiliza fundamentalmente en la etapa de calibración, utilizando la información contenida en las matrices de datos espectroscópicos de las muestras (X), y de los datos de referencia (Y) obtenida a partir de los valores obtenidos por otros métodos analíticos o sensoriales como es el caso de esta tesis. A partir de dichos conjuntos de datos matriciales, este método trata de reducir el efecto de aquellas variaciones no significativas, con independencia del grado de variación, presentes en la matriz (X) en el calibrado. Se busca, además, la máxima variabilidad en la matriz (X) y la mayor correlación posibles con la matriz (Y) (Höskuldsson, 1996). Como la regresión se realiza en un espacio ortogonal, se evitan los problemas que son consecuencia de la colinealidad de las variables.

Para la realización de los artículos referidos en esta tesis, se ha utilizado el método MPLS modificado. Dicha variación consiste en que los valores residuales de la espectroscopía NIR para cada longitud de onda y muestra, calculados sobre las nuevas variables latentes, factores o componentes, se estandarizan. Ello quiere decir que dichos valores se dividen por la desviación estándar correspondiente a los valores residuales a cada longitud de onda y para todas las muestras. Este proceso se repite para cada variable latente antes de calcular la siguiente, haciendo que esta variante del algoritmo sea más precisa y estable que su antecesor PLS.

El proceso de calibración tiene como objetivo la determinación de los parámetros del modelo necesarios, que permitan predecir los valores del parámetro en estudio sobre futuras muestras. Esta regresión ha de realizarse de tal forma que los residuales sean lo más pequeños posibles, lo que confirmaría la proximidad entre los valores observados y esperados, dando una valoración de la bonanza de la capacidad de predicción del modelo obtenido.

Se utiliza la validación cruzada (cross validation) como metodología para construir el modelo de calibración. Ésta utiliza muestras del bloque de calibración para comprobar el modelo. Mediante este método, el conjunto de muestras se divide en varios bloques o segmentos. El modelo se construye tantas veces como número de segmentos se ha elegido, utilizando un segmento como bloque de datos para comprobar los resultados y el resto para construir el modelo, de forma que cada vez se deja un segmento fuera, comprobando el valor del Error Estándar de Validación Cruzada (SECV). Es por ello, que se debe llegar a una solución de compromiso tratando de obtener el modelo más simple con la mejor capacidad predictiva. Para determinar el número de variables latentes a considerar como adecuado, se parte del establecimiento de un valor de SECV mínimo.

Durante este proceso, también se detectan muestras que presentan un valor residual (diferencia entre los valores observado y esperado) alto. Estas muestras se eliminarán del conjunto de calibración, si su valor residual dividido por el SECV del proceso supera el valor de 2.5. Este criterio recibe el nombre de "criterio T". Para obtener el modelo final, este procedimiento se ha de repetir dos veces. (*WinISI II*, v. 1.50., 2000)

$$T = \frac{\text{residuo}}{\text{SECV}} \quad (3.19)$$

La obtención de la ecuación de calibrado del modelo final requiere del empleo de algunos parámetros, los cuales se determinan a partir de datos obtenidos con la ecuación de calibración en estudio:

- **RSQ (R-Square):** Coeficiente de Correlación Múltiple. Mide el grado de ajuste de la ecuación de calibrado a los datos.

$$RSQ = 1 - \left(\frac{\sum_{i=1}^N (y_{esp_i} - \hat{y}_{obs_i})^2}{\sum_{i=1}^N (\hat{y}_{obs_i} - \bar{y})^2} \right) \quad (3.20)$$

- **SEC** (Standard Error of Calibration): Error Estándar de Calibración.

$$SEC = \sqrt{\left(\frac{\sum_{i=1}^N (y_{esp_i} - \hat{y}_{obs_i})^2}{N-p-1}\right)} \quad (3.21)$$

- **BIAS**: Es la media de los valores residuales, siendo éstos la diferencia entre el valor de referencia o esperado (y_{esp_i}) y el valor predicho u observado (\hat{y}_{obs_i}).

$$residuo, f_{ij} = (y_{esp_i} - \hat{y}_{obs_i}) \quad (3.22)$$

$$BIAS = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_{esp_i} - \hat{y}_{obs_i}) \quad (3.23)$$

- **SECV** (Standard Error of Cross Validation): Error Estándar de Validación Cruzada.

$$SECV = \sqrt{\left(\frac{\sum_{i=1}^N (y_{esp_i} - \hat{y}_{obs_i} - BIAS)^2}{N-1}\right)} \quad (3.24)$$

- **Rango de aplicabilidad**: Rango de valores del parámetro de referencia para el que es posible la aplicación de la ecuación del modelo.

En estas expresiones anteriores, el significado de cada uno de los términos es el siguiente:

y_{esp_i} : es el valor esperado, de referencia o de laboratorio que ha sido obtenido por otro tipo de análisis (físico-químico, sensorial, etc) para cada *muestra(i)*.

\hat{y}_{obs_i} : es el valor observado, calculado o predicho con la ecuación de calibración, para cada *muestra(i)*.

\bar{y} : es la media de los datos calculados.

N : es el número de muestras que pertenece al subconjunto de calibración.

p : es el número de variables latentes, factores o componentes implementados en la ecuación de calibración.

Algunos de los parámetros que se utilizan en la validación interna son:

- **RSQ**: Se calcula a partir de la regresión entre los valores de referencia esperados y los predichos u observados obtenidos a partir de la espectroscopía NIR. (3-20)

- *SEP* (Standard Error of Prediction): Error Estándar de Predicción.

$$SEP = \sqrt{\left(\frac{\sum_{i=1}^N (y_{esp_i} - \hat{y}_{obs_i})^2}{N}\right)} \quad (3.25)$$

- *SEP(C)*: error SEP corregido por el BIAS.

$$SEP(C) = \sqrt{\left(\frac{\sum_{i=1}^N (y_{esp_i} - \hat{y}_{obs_i} - BIAS)^2}{N-1}\right)} \quad (3.26)$$

- *BIAS*: Es el concepto explicado anteriormente (3-22 y 3-23)
- *RPD* (Ratio Performance Deviation): Capacidad de Predicción del Modelo. Es la relación entre la desviación estándar de los datos obtenidos por el procedimiento analítico de referencia (físico-químico, sensorial, etc) y el SEP. Aunque el valor ideal ha de ser superior a 2.5, puede ser válido uno inferior cuando el valor de $SD_{ref} < 1$. (Williams & Sobering, 1993; Rosenthal et al., 1996)

$$RPD = \frac{SD_{ref}}{SEP} \quad (3.27)$$

El último paso para la determinación definitiva del modelo, es la comprobación de la eficiencia del mismo con muestras diferentes a las utilizadas en la calibración. Para ello se procede a realizar el proceso de *validación externa*, consistente en la aplicación de las ecuaciones de calibración del modelo en estudio a un conjunto de muestras que no hayan sido utilizadas para el proceso de calibración. Algunos de los parámetros que se evalúan son:

- Valor medio de los residuales.
- Porcentaje de error del valor predicho respecto al valor de referencia.
- *RMSE* (Root Mean Square Error): Raíz cuadrada del Error Cuadrático Medio. N es el número de muestras utilizadas en el proceso de validación externa.

$$RMSE = \sqrt{\left(\frac{\sum_{i=1}^N (y_{esp_i} - \hat{y}_{obs_i})^2}{N}\right)} \quad (3.28)$$

- *Test T de Student para valores apareados*: Esta prueba permite comprobar si los valores obtenidos por el método de referencia y los obtenidos mediante espectroscopía NIR, proporcionan valores significativamente iguales o no.

3.6.4. Análisis cualitativo. Discriminación por RMS-X

El análisis cualitativo trata de categorizar un producto en función de una o más de sus características. En gran parte de las ocasiones, la categorización permitirá separar aquellas muestras que presentan desviaciones muy marcadas, frente a aquellas que representan el comportamiento o las características deseadas para el producto.

Partiendo del conjunto de datos de los espectros de muestras de un producto que abarcan la variación esperada del mismo y aplicando sobre ellos el método PCA descrito en forma matricial, los datos espectrales preprocesados, X , pueden ser descompuestos en las matrices T , P y E según la siguiente ecuación:

$$X = T \cdot P^T + E \quad (3.29)$$

donde:

- T es la matriz en la que se almacenan los valores de cada una de las cargas correspondientes a cada muestra.
- P es la matriz que contiene las cargas, los espectros ocultos o las estructuras comunes.
- E es la matriz que contiene los valores residuales, también llamada residuos, para cada dato de la muestra, representando la parte que el modelo no es capaz de describir.

A partir de la expresión anterior, existen dos formas de determinar la distancia entre dos muestras: midiendo la distancia hasta el centro en el interior del modelo (calculada a partir de los resultados) o midiendo la distancia existente hasta el modelo (calculada a partir de los residuos).

Según lo anterior y ante una nueva muestra, podemos encontrarnos ante tres escenarios diferentes:

- Los datos del espectro de la nueva muestra presentan únicamente una desviación en el espacio de los resultados. Es el caso de una muestra que presenta un patrón comparable con los de los buenos productos, pero que dispone de valores de concentración atípicos, muy por encima o muy por debajo del resto de las concentraciones de los buenos productos.
- Los datos del espectro de la nueva muestra presentan únicamente una desviación respecto de los valores residuales. Es el caso de una muestra que presenta un valor atípico del patrón espectral. Los niveles de concentración de la muestra son comparables a los correspondientes de los buenos

productos, pero el patrón espectral presenta una desviación significativa respecto de los espectros de un buen producto.

- Los datos del espectro de la nueva muestra presentan desviaciones respecto de ambas distancias (resultados y residuos). Es el caso de una muestra que presenta concentraciones y valores atípicos respecto del patrón espectral.

La caracterización previa de un conjunto de espectros que representen muestras de productos ajustados a las especificaciones de calidad, permite la posterior detección de desviaciones de las nuevas muestras. Para ello, se pueden utilizar diferentes métricas como la distancia de Mahalanobis (distancia entre un espectro y el espectro medio del conjunto de datos), distancia vecina de Mahalanobis (distancia entre un espectro y el espectro más cercano en el conjunto de datos), o las basadas en los valores residuales (pico Máximo T, método ASM, RMS X, residual Máximo X y residual T Máximo X).

El método de los valores residuales RMS X se fundamenta en el análisis de los datos contenidos en la matriz E (3.29) que recordemos almacena la parte de un espectro que no se puede explicar con el modelo PCA. Para obtener los valores residuales RMS X se calcula la raíz cuadrada de la media aritmética de los cuadrados de los valores residuales de las muestras. Este valor resulta útil cuando se quiere detectar, en las nuevas muestras, una variación espectral diferente a la mostrada por el conjunto de datos de los productos de referencia. Este procedimiento resulta adecuado para la detección de variedades en los patrones espectrales, haciendo posible la categorización de las muestras. También requiere el empleo de tratamientos matemáticos (MSC, SNV, DT o SNV-DT), derivadas y procedimientos de suavizado para encontrar la mejor discriminación entre las muestras

3.7. Ventajas e inconvenientes de la espectroscopía NIR.

Ventajas

Como técnica analítica presenta las siguientes ventajas:

- Es no destructiva por lo que podría ser implementada on-line e in-line.
- Es multiparamétrica. Esto quiere decir que es posible la determinación de varios parámetros e identificación de compuestos de forma simultánea, a partir de un único conjunto de espectros.
- Es posible el análisis de muestras tanto sólidas como líquidas o pastosas.
- Elimina el uso de disolventes o reactivos.
- Su exactitud es comparable a la de otras técnicas analíticas.

- El coste de análisis por muestra es bajo como consecuencia de la ausencia de tratamiento previo y de la rapidez en las mediciones.

Inconvenientes

- La señal obtenida en los equipos NIRS es muy compleja. Las bandas del espectro son de difícil interpretación de forma directa, o a simple vista, lo que hace necesario el uso de técnicas quimiométricas junto con la aplicación de diferentes pretratamientos espectrales para el tratamiento de las señales.
- Las bandas son muy anchas y se superponen siendo necesario tratamientos matemáticos para obtener información de interés.
- El desarrollo de modelos de predicción es lento al necesitar calibraciones robustas. Ello requiere el conocimiento previo de las variables que van a ser determinadas, razón por la que se utilizan los métodos de referencia que deben proporcionar valores precisos y exactos.
- El soporte matemático de la espectroscopía NIR es una aproximación a la ley de Beer y, por lo tanto, presenta frecuentes desviaciones de la linealidad.
- En la mayor parte de las técnicas instrumentales basadas en la interacción de una radiación con la materia, como es el caso de la espectroscopía NIR, las leyes matemáticas que las rigen son complejas.
- El coste de un equipo NIRS es elevado inicialmente aunque se compensa por su rendimiento posterior.

3.8. Aplicaciones de la espectroscopía NIR en alimentos

La buena calidad en la producción de alimentos de consumo humano y animal, requiere la determinación fiable y precisa de la composición de las materias primas, así como de los productos intermedios y finales. También es necesario poder detectar muestras que presenten desviaciones causadas tanto por adulteraciones como por procesos incorrectos. La necesidad de contar con métodos eficaces para la detección de las posibles adulteraciones o desviaciones en procedimientos que forman parte de los procesos de elaboración de un producto alimenticio, resultan obvias. La espectroscopía NIR, junto con otras técnicas quimiométricas, se ha postulado como herramienta rápida, precisa y aplicable a una gran cantidad de alimentos.

Los primeros trabajos documentados referidos a mediciones en el espectro correspondiente al infrarrojo cercano, datan de principios del s.XIX (Herschel, 1800). Sin embargo, no es hasta mediados del s.XX cuando comienzan a publicarse los primeros estudios analíticos en los que se describe el empleo de NIR para mediciones

sobre moléculas relacionadas con el hidrógeno (CH, NH, OH) (Kaye, 1954). El desarrollo posterior de la técnica aplicada a la biología (Norris & Butler, 1961), de las mejoras en la instrumentación así como de los tratamientos quimiométricos necesarios para la interpretación de los resultados (Savitzky & Golay, 1964; Draper, 1966), hicieron que esta técnica tuviese gran aceptación extendiéndose rápidamente a otros campos para su aplicación en estudios tanto cualitativos como cuantitativos (Osborne, 1986).

Las primeras aplicaciones en el campo agroalimentario de la espectroscopía NIR, cuyas referencias se han encontrado, se dirigieron al estudio de la calidad sensorial de las salchichas (tanto en la modalidad de reflectancia como transmitancia) analizándose atributos de color, olor, sabor y textura (Ellekjær et al., 1993), productos lácteos en polvo, leche líquida, queso, mantequilla y productos lácteos fermentados (Rodríguez-Otero et al., 1997), hacia la determinación del contenido de grasa, proteína total y lactosa de la leche no homogeneizada para su uso en la gestión de la industria láctea (Tsenkova et al., 1999) o más específicamente en la determinación de similares parámetros de calidad en la leche ovina (Albanell et al., 1999). La aplicación de la tecnología NIRS también se inicia sobre productos cárnicos siendo las primeras referencias encontradas (modalidades NIR de reflexión y transmisión) para la determinación de atributos como dureza, ternura, jugosidad, textura y fuerza de corte Warner Bratzler (WBSF) en carne de vacuno (Hildrum et al., 1994; Byrne et al., 1998). También y en los mismos años, se inician los primeros estudios acerca del uso de la espectroscopía NIR para la evaluación de alimentación animal para animales domésticos, que satisfagan las necesidades nutricionales de los mismos mejorando la producción de carne, leche, lana y huevos (Givens et al., 1997)

En la actualidad, su campo de aplicación se ha extendido a una gran cantidad de productos alimenticios para la obtención de la "huella dactilar" de la muestra de un producto, que permita su categorización en función de diferentes parámetros o la determinación y predicción de características fisicoquímicas y organolépticas. Caben destacar la siguiente literatura:

- Productos cárnicos y pescado. La aplicación de la espectroscopía NIR sobre productos cárnicos es muy variada. Se han encontrado referencias a estudios sobre fuet (Bouhzam, 2020); predicción de la grasa intramuscular en la carne de cordero (Hitchman et al., 2021); clasificación de pechugas de pollo según criterios de calidad (Løvland & Wold, 2020) o la determinación de atributos sensoriales en cecina (Isabel Revilla et al., 2020).

Sobre este mismo tipo de productos se han encontrado estudios que tratan de comparar el uso de equipos NIRS de diferentes marcas contemplando aquellos modelos fijos y portátiles para la determinación de minerales (Fe, P, MG, S, Na y Pb entre otros) en carne de vacuno (Patel et al., 2020). Alguno de estos trabajos profundiza sobre la optimización de preprocesamientos y métodos multivariantes cualitativos y cuantitativos para el sector cárnico. (Prieto et al., 2017).

Así mismo, también se han encontrado trabajos que comparan diferentes sistemas de recogida de datos de la muestra, como son las tecnologías NIRS, visión por ordenador y nariz electrónica (Huang et al., 2014) o que realizan discriminaciones a partir de datos NIRS y del espectro visible capturando información sobre el contenido de grasa intramuscular, proteína y agua, y ello sobre charqui de diferentes especies como son la bovina, llama y caballo (Mamani-Linares et al., 2012).

En el caso del pescado, la literatura encontrada es escasa y orientada a la evaluación de la composición físicoquímica, microbiológica y sensorial, permitiendo la autenticación del pescado y su clasificación (Liu et al., 2013).

- Productos hortofrutícolas y frutas. Tradicionalmente, la calidad externa (apariencia) de este tipo de productos se realiza mediante inspección visual, mientras que los índices de calidad interna habitualmente se determinan por métodos destructivos. Como consecuencia de la lentitud del proceso y su alto coste, debido en parte a la naturaleza destructiva del mismo, sólo se analizan unos pocos ejemplares cada día. Además, la tendencia reciente en la agroindustria es la disminución de la evaluación subjetiva de la calidad y la adopción creciente de técnicas objetivas, cuantitativas y no destructivas de evaluación que puedan ser implementadas "on-line" e "in-line". La aplicación de la espectroscopía NIR en este campo, ha permitido abordar la predicción de características físico químicas (color, grosor de la pared, firmeza, sólidos solubles totales, pH entre otras) sobre pimientos de seis tipologías diferentes (Toledo-Martín et al., 2014); sobre judías comunes para las que se predice el aroma, el sabor, la percepción, el brillo o la rugosidad de la cubierta de la semilla (Plans et al., 2014); el análisis para la determinación de la calidad de las patatas (López et al., 2013); la medición de la calidad interna de cítricos (Magwaza et al., 2012) y más concretamente sobre naranja y pomelo, sobre los que se realizaron mediciones para la determinación de los parámetros de dulzor y sabor, considerados como atributos sensoriales apreciados y

utilizados para el control de la calidad del cítrico, así como para la fijación de precios de la fruta en el mercado (Ncama et al., 2017); detección de presencia de herbicidas en aceitunas (Salguero-Chaparro et al., 2013); predicción de los parámetros de calidad interna y externa de las fresas (variedad *Fragaria x ananassa* Duch) relacionados con el color (L^* y a^*), firmeza, contenido de sólidos solubles y acidez (Sánchez et al., 2012; Mancini et al., 2020) o con su discriminación a partir de la calidad interna inicial de las fresas obtenidas por sistemas diferentes de gestión de la fertilidad, y para las que se predijeron el contenido total de sólidos solubles, pH, acidez, contenido de ácido ascórbico y contenido fenólico (Amodio et al., 2017); la determinación del contenido de sólidos solubles (SSC) y de materia seca (DMC) en cerezas dulces ('Chelan' y 'Bing') a dos temperaturas diferentes, 0 y 23 °C (Escribano et al., 2017); la predicción del índice de madurez de mangos de la India (Jha et al., 2014). También se han descrito estudios más generalistas que abarcaban más de un tipo de fruta como los centrados en las frutas de hueso (nectarina, melocotón, albaricoque, ciruela japonesa) y para las que se han estudiado aquellos parámetros considerados como importantes para la determinación de la calidad (concentración de sólidos solubles, concentración de materia seca y firmeza de la pulpa) (Scalisi & O'Connell, 2020); los que tratan de predecir la madurez de la fruta, su firmeza, acidez, contenido fenólico, sólidos solubles, vitamina C, contenido de humedad, defectos en la apariencia, contaminantes, índice de almidón, azúcar y extracto seco (Chandrasekaran et al., 2019). Otros estudios generalistas describen la aplicación de la espectroscopía NIR en frutas y verduras, sobre las que se ha estudiado el contenido total de sólidos solubles como indicador de dulzura, la acidez, el extracto seco como indicador de la madurez aunque sólo para algunos casos, el contenido de humedad como indicador de la jugosidad, el contenido de licopeno como responsable del color rojo de la sandía o el tomate y propiedades de textura, como firmeza y dureza (Sirisomboon, 2018); la estimación de la calidad sensorial de tomates mediante la predicción de 19 atributos sensoriales tratando de determinar las longitudes de onda más informativas (Li et al., 2021) o la estimación del dulzor, la fibrosidad y el mal olor en los "calçots" cocidos (Sans et al., 2020).

En ocasiones, estos estudios amplían las técnicas a valorar no restringiéndose únicamente a la tecnología NIRS, comparando los resultados obtenidos con los de otras técnicas como la espectroscopía dentro del espectro visible, la viabilidad de los diferentes modos espectrales: reflectancia, absorbancia y

transmitancia o el uso de imágenes multiespectrales e hiperespectrales, para la medición de los atributos de calidad (contenido de sólidos solubles, acidez, firmeza, contenido de extracto seco, vitamina C, polifenoles y pigmentos) en frutas como la manzana, naranja, kiwi, melocotón, uva, fresa, plátano y mango entre otras, así como la discriminación entre las diferentes variedades de las diversas especies de frutas. (H. Wang et al., 2015).

- **Propóleos.** El propóleo se utiliza cada vez más como suplemento dietético o como ingrediente de diferentes productos alimentarios debido a sus propiedades antioxidantes y bactericidas. Sus propiedades nutricionales dependen directamente de su composición, razón que motiva los estudios que se presentan. La aplicación de la tecnología NIRS ha permitido la discriminación del origen geográfico y la determinación del contenido de los principales flavonoides del propóleo chino (Cai et al., 2012) o la determinación rápida del contenido de crisina y la galangina (Nie et al., 2013). En este último estudio cabe destacar el uso de herramientas de inteligencia artificial como las redes neuronales feedforward backpropagation o las máquinas de soporte vectorial. Más recientemente y tomando como materia prima propóleos recogidos en Chile y España (regiones de Castilla y León y Galicia), la espectroscopía NIR ha permitido determinar la composición mineral para detectar la presencia de aluminio, calcio, hierro, potasio, magnesio, fósforo y a la existencia de trazas de oligoelementos que pudieran ser tóxicos como el zinc, el cromo, el níquel, el cobre y el plomo (González-Martín et al., 2015), la cuantificación del contenido total de flavonas y flavonoles, flavanonas y dihidroflavonoles, así como la capacidad antioxidante (Betances-Salcedo et al., 2017), la presencia de plaguicidas (triadimefón) (González-Martín et al., 2017), su color (L^* a^* b^*) y propiedades biocidas (Revilla et al., 2017) o su composición fenólica (Betances-Salcedo et al., 2017; Vivar-Quintana et al., 2018).
- **Bebidas.** En el caso de las bebidas, hay estudios generalistas que se centran en la detección de los atributos de calidad de varios alimentos líquidos, incluyendo bebidas alcohólicas (vinos y cerveza), bebidas no alcohólicas (zumos, vinagres de frutas, bebidas de café y cola), productos lácteos (leche y yogur) y aceites (vegetal, de camelia, de cacahuete, de oliva virgen y de fritura) (Wang et al., 2017).

En el caso de bebidas alcohólicas, la espectroscopía NIR se ha utilizado para la evaluación rápida de la calidad de la cerveza artesanal durante el proceso de fermentación (Giovenzana et al., 2014) o para la caracterización

cualitativa del envejecimiento de la misma con el empleo de otras herramientas computacionales como son los algoritmos genéticos (Ghasemi-Varnamkhasti & Forina, 2014).

En lo que respecta al vino, su análisis sensorial implica la medición, interpretación y comprensión de las respuestas humanas a las propiedades percibidas por los sentidos, como la vista, el olfato y el gusto. Es por ello por lo que su evaluación sensorial suele realizarse por jueces, enólogos y personal técnico, responsables de caracterizar la calidad del vino. Sin embargo, este método es largo, costoso y muy dependiente de la formación del panel de cata, por lo que el uso de la espectroscopía NIR ayuda a evaluar la calidad y propiedades sensoriales de las variedades comerciales del vino, de forma imparcial y barata, beneficiando a la industria vinícola (Cozzolino et al., 2008). También ha sido utilizada para determinar los parámetros sensoriales de los hollejos de la uva, como son los atributos gustativos (acidez), de textura (astringencia, intensidad tánica, sequedad y dureza), visuales (color) y olfativos (intensidad y tipo de aroma), para la toma de decisiones sobre el momento óptimo de la cosecha, produciendo vinos tintos de alta calidad (Ferrer-Gallego et al., 2013).

Más recientemente se ha empleado para la tipificación de vinagres de vino españoles con DOP "Vinagre de Jerez", "Vinagre de Condado de Huelva" y "Vinagre de Montilla-Moriles", frente a otros 11 vinagres de vino sin DOP, para proteger sus marcas y evitar la adulteración y la competencia desleal (Ríos-Reina et al., 2018).

En el caso de las bebidas no alcohólicas, como zumos, también son numerosos los estudios publicados sobre la aplicación de la tecnología NIRS. Entre ellos se han encontrado algunos como el realizado para la determinación de los parámetros de calidad interna de las naranjas de mesa, como el contenido de vitamina C, mediante espectroscopía NIR y aprendizaje automático y en el que se evaluó el rendimiento predictivo a partir de los espectros NIR obtenidos de la superficie de la naranja y del propio jugo (Liu et al., 2015); o el realizado para la evaluación de la pureza (natural o sintética) del zumo de lima con el uso combinado de la espectroscopía NIR y el empleo de algoritmos genéticos y de clasificación, incluyendo redes neuronales de función de base radial (RBF) o SVM. De este último estudio se concluye que los métodos de reducción dimensional, como PCA, no siempre conducen a resultados más precisos al eliminarse características relevantes

que producen un buen rendimiento con el clasificador SVM. También y sobre zumo de lima, es interesante el estudio comparativo realizado por Jahani (2020) sobre la aplicación novedosa de la espectroscopía NIR por medio de un espectrofotómetro portátil miniaturizado y la quimiometría, ambos aplicados para la detección de la adulteración de este zumo. En el estudio se comparan las mediciones realizadas sobre zumos de lima puros y adulterados, sobre las que se aplicaron diferentes técnicas de preprocesamiento espectral (SNV, MSC, derivada 2ª, etc) y métodos diferentes del tratamiento posterior de los datos (PCA, DA-PLS, k - NN, etc.).

El uso de la espectroscopía NIR en estudios sobre infusiones (té y café) también es amplia al tratarse de bebidas muy populares que disfrutan dos tercios de la población mundial. Estos estudios incluyen la medición de la composición química, la evaluación de los atributos sensoriales, la identificación de categorías y variedades, así como la discriminación de los orígenes geográficos de té (Zhu et al., 2019) o de té negro (Ouyang et al., 2017). En el caso del café y mezclas de variedades de éste, parámetros como el color de tueste de los granos de café o los correspondientes a la composición varietal de las mezclas, son factores clave de las propiedades sensoriales de la infusión de café. El primero es un parámetro de control crítico para el proceso de tueste y permite verificar rápidamente el rendimiento del tueste, estando directamente relacionado con las características organolépticas de la bebida. Por otro lado, la composición varietal es un factor primordial que afecta a los parámetros de calidad. Se han encontrado estudios de la aplicación de NIRS sobre muestras de café arábigo tostado para predecir los valores de acidez, amargor, sabor, limpieza, cuerpo y calidad general de la bebida de café (Bertone et al., 2016; Ribeiro et al., 2011).

- Análisis de alimentos y control de calidad en procesos de producción. El uso de la espectroscopía NIR en sus diferentes versiones, como técnica analítica de procesos (PAT por sus siglas en inglés de Process Analytical Technique) implementada en la industria de procesamiento de alimentos y a lo largo de la propia cadena de producción y elaboración, también dispone de una profunda y prolija documentación. La PAT puede mejorar la calidad del producto final y la eficiencia de los procesos al mejorar la comprensión y el control de los procesos que participan en la elaboración de un alimento. La espectroscopía NIR es capaz de obtener "huellas dactilares" de los productos de forma "in-line", monitorizando en tiempo real los diferentes procesos

(Grassi & Alamprese, 2018). Hay estudios en diferentes campos de aplicación, lo que da una idea de su enorme versatilidad y potencial derivados de su rápida velocidad de detección y a la posibilidad de predecir, simultáneamente, múltiples parámetros de calidad o distinguir entre productos según objetivos. La posibilidad de automatizar los procesos es una gran ventaja en comparación con los análisis rutinarios fuera de línea, principalmente por el ahorro de tiempo, material y personal que se consigue (Cortés et al., 2019). La realización de análisis cuantitativos y determinaciones cualitativas para el control de la autenticidad, la discriminación de muestras, la evaluación de las propiedades sensoriales, reológicas o tecnológicas, y los atributos físicos, se han estudiado tanto en alimentos de origen animal como vegetal y, a escala industrial, comprenden mediciones en cintas transportadoras en movimiento, en flujos continuos en tubos y en la supervisión de procesos de fermentación, tanto en línea como fuera de línea y tanto antes como durante su procesamiento. Para lograr estos fines se requiere el desarrollo de diferentes diseños constructivos de espectrómetros NIR, dispositivos portátiles, sondas de fibra óptica y de contacto directo, así como sondas integradas en tubos que miden a través de ventanas o la carga automatizada de muestras (Porep et al., 2015). Se han encontrado estudios que se centran en el control de la seguridad alimentaria en la carne, el pescado y derivados, aceites, la leche y productos lácteos, los cereales y derivados, las frutas y verduras (Qu et al., 2015) y más específicamente en la carne y los productos cárnicos (De Marchi et al., 2017; Dixit et al., 2017). También sobre aceites de oliva vírgenes (AOV) monovarietales de Cornicabra, producidos en la zona geográfica de la DOP "Montes de Toledo", en los que se trató de predecir su composición fenólica y volátil, así como sus atributos organolépticos ("afrutado" y "amargo"), como indicadores de la calidad global del producto, dando información sobre la composición del aceite de oliva durante su procesamiento en tiempo real, lo que permite un mayor control automatizado de los parámetros tecnológicos (Inarejos-García et al., 2013). La implantación del espectrómetro sobre las propias cintas de transporte en las almazaras, ha permitido la realización de análisis cuantitativo y cualitativo de frutos y aceites de oliva (Salguero-Chaparro et al., 2012).

Otro producto que se ha beneficiado recientemente de la implementación del análisis por NIRS en la industria, es el cacao. El cacao en grano es un producto que se produce, de forma mayoritaria, en los países en desarrollo

pero que se consume en todo el mundo en diversas formas. La detección rápida de la calidad del cacao en grano y de los productos derivados del cacao en la cadena de valor poscosecha, ha cobrado protagonismo centrándose en la predicción de la categorización, la autenticación, la composición química y los atributos sensoriales que permitan su clasificación geográfica, evitando situaciones de fraude y garantizando la seguridad alimentaria (Teye et al., 2020).

En ocasiones y debido a la necesidad de obtención de resultados en cortos periodos de tiempo, estos estudios constatan la necesidad de apoyarse en modelos no lineales como las ANN, las SVM y el Machine Learning (Zareef et al., 2020).

- Productos cárnicos de cerdo. Los productos cárnicos porcinos han sido objeto de artículos presentados en esta tesis. La aplicación de la espectroscopía NIR sobre carne de cerdo, antes y después de su proceso de curación, está ampliamente documentada.

Los estudios encontrados describen la determinación de la composición de la carne de cerdo curada, con la finalidad de evaluar la cantidad de colágeno en los tejidos conectivos frente a la carne magra (músculo) a partir de la cuantificación del aminoácido hidroxiprolina en salchichón y chorizo (González-Martín et al., 2009); la predicción de humedad, actividad del agua (a_w) y contenido de NaCl en la superficie del jamón curado (Collell et al., 2011); la determinación de los perfiles de los ácidos grasos saturados (AGS), monoinsaturados (AGMI) y poliinsaturados (AGP) (o SFA, MUFA y PUFA por sus siglas en inglés respectivamente) en muestras de embutidos ibéricos (Fernández-Cabanás et al., 2011); la clasificación de los jamones según su tiempo de maduración con la ayuda de técnicas quimiométricas no lineales como las redes neuronales de Kohonen y Backpropagation (Prevolnik et al., 2014) o la construcción de clasificadores capaces de categorizar las muestras por ternura (tierna o dura) y jugosidad (jugosa y seca) (Balage et al., 2015).

Más recientemente, se han descrito usos de la espectroscopía NIR para predecir el contenido de sodio en lonchas de jamón curado, proponiendo una metodología que reduzca el error causado por el efecto de las fluctuaciones de temperatura de la muestra, en la predicción del modelo NIRS (Campos et al., 2017, 2018), así como la monitorización de la etapa de salado que permita corregir posibles defectos en el producto final, prediciendo el estado de la carne (Campos et al., 2020; Pérez-Santaescolástica et al., 2019); la

determinación de isótopos estables y ácidos grasos en muestras subcutáneas de cerdo ibérico (González-Martín et al., 2020) o la predicción del contenido de humedad, grasa y proteína en la carne de cerdo en general (Mishra et al., 2021). En este último trabajo es de destacar que, en lugar de elegir aquella técnica de corrección de la dispersión que eliminase los errores generados por la misma para aportar mayor rendimiento, se optó por fusionar los resultados de las diferentes técnicas correctoras antes de la aplicación de las técnicas quimiométricas.

También se han descrito estudios sobre la aplicación de la tecnología NIRS durante las etapas de procesamiento de otros productos cárnicos de cerdo. En el estudio presentado por González-Mohino et al, (2020) se monitorizaron salchichas por medio de un dispositivo NIRS portátil, prediciéndose los valores de parámetros como la pérdida de peso, pH, contenido de humedad, actividad del agua, color y dureza entre otros, lo que permite la clasificación de las muestras en función de la etapa, ayudando en las decisiones sobre el avance de las salchichas a la siguiente etapa de procesamiento.

Otros estudios más amplios describen la aplicación de la espectroscopía NIR, frente a métodos tradicionales con tiempos de respuesta cercanos a los 6 días, para la determinación de parámetros como el contenido en proteínas, lípidos, sal e hidratos de carbono, en productos cárnicos de cerdo ibérico (jamón, lomo, paleta, salchichón y chorizo) y que han de especificarse en las etiquetas de dichos productos, como consecuencia de la entrada en vigor de nuevas normativas (Caballero et al., 2019)

- Leche y productos lácteos derivados. La leche y los productos lácteos son reconocidas como excelentes fuentes de nutrición a nivel mundial. Garantizar tanto la autenticidad de la leche como la de los productos lácteos derivados es importante y tiene amplias implicaciones sanitarias y financieras. La detección de la adulteración de la leche es vital para el comercio justo y para proteger a los consumidores del fraude alimentario, así como de riesgos sanitarios como consecuencia de la introducción de sustancias peligrosas en la cadena de suministro de los productos lácteos. La melamina es una sustancia química nitrogenada utilizada principalmente como material de partida para la fabricación de resinas sintéticas. Debido a su altísima proporción de nitrógeno, la melamina se ha añadido de forma ilegítima a alimentos como la leche líquida, en polvo o en los preparados para lactantes, con el propósito de incrementar los indicadores proteicos adulterando el valor

del producto. En otras ocasiones, se han registrado casos de adulteración de la leche en los que se han añadido sustancias como agua, proteínas extrañas, urea, grasas vegetales o animales, etc; o en las que la adulteración se produce con el añadido de leches de otras especies (mezclas de leche caprina con bovina o de vacuno con las anteriores). La aplicación de la espectroscopía NIR permite la detección rápida de este tipo de adulteraciones (Holroyd, 2013; Henn et al., 2017; Poonia et al., 2017; Pereira et al., 2020). También se han encontrado referencias a estudios en los que se realizan modificaciones composicionales de la leche, con el objetivo de producir un nuevo alimento funcional. Un estudio interesante es el presentado por Aliakbarian et al.(2015) en el que se discrimina mediante espectroscopía NIR y con la ayuda de técnicas multivariantes, muestras de leche probiótica según el tipo de extracto añadido como lo pueden ser extractos fenólicos acuosos, procedentes de orujos de aceituna y de uva. En otras ocasiones se persigue determinar la composición de ácidos grasos y vitaminas liposolubles, así como la estación de producción de leche de oveja, mediante espectroscopía NIR (Revilla et al., 2017). Por otro lado y de manera similar a lo ya descrito para otros alimentos, la monitorización en tiempo real de los productos lácteos puede lograrse utilizando PAT para su implementación on-line e in-line. Se han encontrado trabajos en los que se describe el proceso de medición, las configuraciones óptimas de los instrumentos, métodos de muestreo en línea, modelos de calibración, así como otras consideraciones prácticas que permitan la implantación para la monitorización continua del proceso en la producción de productos lácteos. (Pu et al., 2020).

No obstante, la mayoría de los estudios de la aplicación de la espectroscopía NIR en lácteos y derivados, se han centrado en el queso y con menor relevancia en la mantequilla, la leche en polvo y en el yogur. Añadir a este respecto que la espectroscopía NIR en los modos de reflectancia o transmitancia ha sido más frecuente que la espectroscopía MIR. El trabajo presentado por De Marchi et al (2018) se centra en la determinación de componentes químicos difíciles de determinar, como son los ácidos grasos, los minerales y los compuestos volátiles, así como en los atributos sensoriales y el tiempo de maduración.

Respecto del empleo de la espectroscopía NIR en la elaboración del queso en sus diferentes variedades, el número de publicaciones es extenso. Las primeras que se han encontrado se refieren a determinación del porcentaje de leche (de vaca, oveja y cabra) utilizado en la elaboración de quesos con

diferentes tiempos de maduración (González-Martín et al., 2007), el análisis de la textura de quesos de oveja elaborados con leche de tres razas de oveja (castellana, churra y assaf) con diferentes recuentos de células somáticas (SCC) (Revilla et al., 2009), discriminación por tipo de producción (granjas alpinas, fábricas de montaña y de tierras bajas) del queso Asiago d'Alveo a partir de la composición química y el color (Cozzi et al., 2009), la evaluación de diferentes atributos, visuales (presencia de agujeros), gustativos (sabor salado, mantecoso), de textura (dureza, masticabilidad, cremosidad), de sabor rancio y otras sensaciones (acritud, sensación retronasal), en quesos elaborados con leche de composición variable (vaca, oveja, cabra), tomando como dato de referencia la evaluación de las propiedades sensoriales obtenida por un panel de catadores (González-Martín et al., 2011a), la determinación de los contenidos de calcio (Ca), fósforo (P), magnesio (Mg), potasio (K) y sodio (Na) en quesos elaborados con porcentajes entre 0-100% de leche de diferentes especies (vaca, oveja, cabra) (González-Martín et al., 2011b). Otros estudios tratan de buscar la forma de predecir el grado de maduración de los quesos a lo largo de su almacenamiento. Estudios de este tipo son los presentados por (Atanassova et al., 2011; González-Martín et al., 2014; Mlček et al., 2011; Soto-Barajas et al., 2013). Más recientemente, hay aportaciones a la literatura sobre el empleo de la espectroscopía NIR en queso, comparándolas con otras técnicas no destructivas como son las de visión por ordenador (CV), tomografía computarizada (TC), Rayos X, resonancia magnética nuclear (RMN), espectroscopía de fluorescencia, espectroscopía de infrarrojo por transformada de Fourier (FTIR), imágenes HSI, imagen Raman, detección ultrasónica y acústica o imágenes dentro del espectro visible entre otras (Lei & Sun, 2019; Priyashantha et al., 2020). Por último, la adulteración de quesos, como el comercializado en su variedad de rallado, también se ayuda del empleo de la espectroscopía NIR para determinar el grado de adulteración de quesos con niveles de aditivos superiores a los permitidos, así como la presencia de sustancias no auténticas utilizadas para incrementar el peso y el volumen, y por tanto el precio, con la consiguiente estafa al consumidor por el detrimento nutricional y por el etiquetado engañoso (Visconti et al., 2020).

VI. COMPENDIO DE ARTÍCULOS

Artículo 1.

Prediction of Sensory Parameters of Cured Ham: A Study of the Viability of the Use of NIR Spectroscopy and Artificial Neural Networks

(Predicción de parámetros sensoriales de jamón: Un estudio de viabilidad del uso de la espectroscopía NIR y las Redes Neuronales Artificiales.)

Autores: Pedro Hernández-Ramos, Ana María Vivar-Quintana, Isabel Revilla, María Inmaculada González-Martín, Miriam Hernández-Jiménez and Iván Martínez-Martín

Revista: *Sensors* **2020, 20, 5624.** (MDPI Academic Open Access Publishing) (Enviado: 9 de septiembre de 2020. Aceptado: 28 de septiembre de 2020. Publicado: 1 de octubre de 2020). <https://doi.org/10.3390/s20195624>

Índices de calidad:

Cuartil: Q1 Área: Instrument and Instrumentation (datos 2020)

Posición de la revista: 14/64

Número de citas:	3 en Google Scholar
(fecha de consulta 24/06/21)	1 en Web of Science

Artículo 1:

Resumen

El jamón ibérico es un producto gastronómico muy apreciado, siendo uno de los más conocidos dentro y fuera de España. Diferentes normativas europeas y nacionales obligan a garantizar y supervisar tanto la cría del cerdo como la elaboración del jamón, velando por certificar su autenticidad y la calidad superior de este producto. La evaluación de las características sensoriales del jamón ibérico es una de las herramientas para la certificación de esa calidad.

La determinación de parámetros sensoriales en cualquier producto alimenticio, requiere de un panel de cata que ha de ser previamente entrenado y validado por medio de un largo y costoso proceso. Disponer de un sistema rápido, objetivo y exento de la variabilidad propia de los sentidos de percepción humanos, que permita cuantificar los parámetros sensoriales de los alimentos y mejorar el posicionamiento empresarial dentro del mercado, es el deseo de toda empresa del sector alimentario.

Uno de los métodos analíticos que permite la obtención de un perfil químico relacionado con atributos de calidad, entre ellos los sensoriales, es la Espectroscopía NIR. Es un procedimiento rápido, objetivo, no destructivo y que no requiere preparación previa de la muestra. Sin embargo, la interpretación de los resultados NIRS necesita un tratamiento complejo y las Redes Neuronales Artificiales han resultado ser una herramienta quimiométrica fiable para el post-procesado de este tipo de datos, al haber demostrado su utilidad en aquellos casos en los que las relaciones subyacentes a los datos son desconocidas total o parcialmente (Prevolnik et al., 2009).

En este trabajo se ha estudiado la viabilidad del uso de las ANN para la predicción de parámetros sensoriales de jamón ibérico, a partir del análisis previo con espectroscopía NIR. Para ello se analizaron 91 muestras de jamón ibérico curado de forma tradicional entre 24 y 36 meses, pertenecientes a cerdos con dos genéticas diferentes (50% y 100% Ibérico) y sometidos a dos sistemas de alimentación (alimentación en montanera y con pienso comercial). Todas las muestras fueron analizadas en un equipo NIRS (Foss NIRSystem 5000) al que se le acopló una sonda de fibra óptica de reflectancia remota aplicada directamente sobre las muestras de

jamón. Las mediciones se realizaron dentro del rango espectral de $\lambda=1100$ nm a $\lambda=2000$ nm con registros cada $\Delta\lambda=2$ nm, obteniéndose un total de 451 datos. Por otro lado, muestras de los mismos jamones fueron analizadas por un panel de cata constituido por 10 jueces, quienes evaluaron 28 parámetros sensoriales del jamón. El panel de cata disponía de formación en la realización de Análisis Descriptivo Cuantitativo (QDA), además de entrenarse previa y específicamente para este trabajo.

Los espectros NIRS y los resultados de la cata han sido procesados con redes neuronales artificiales feedforward del tipo MLP. Se han evaluado los algoritmos de entrenamiento de tipo "backpropagation" (o retropropagación del error) denominados Scaled Conjugate Gradient (SGC) y Levenberg-Marquardt (LM) y el número de neuronas en la capa oculta se ha determinado empíricamente. Este último valor suele estar comprendido entre el número de neuronas de las capas de entrada y de salida, valores que dependen del propio problema. Para cada algoritmo de entrenamiento se probaron arquitecturas con tres capas: capa de entrada con 451 neuronas, capa oculta con una configuración variable de entre 1 y 30 neuronas y capa de salida, con una única neurona. Las neuronas de la capa de entrada reciben los valores del espectro NIRS que serán procesados por las neuronas de la capa oculta dotadas con una función de transferencia tangente hiperbólica sigmoide. El valor del parámetro sensorial estimado se obtiene en la neurona de la capa de salida, dotada de una función de transferencia lineal pura, debiendo converger hacia el valor asignado por el panel de cata.

Cada modelo de red fue entrenado partiendo de 30, 100 y 500 estados iniciales diferentes. En cada estado inicial de partida, los pesos de las conexiones y los umbrales de excitación de las neuronas fueron inicializados aleatoriamente a partir de un valor semilla conocido, lo que permite la reproducibilidad de los datos (Pillonel et al., 2005). Para todas las ANN probadas, el conjunto de pares de datos espectro NIRS-evaluación sensorial se dividió al azar en tres conjuntos de datos: conjunto de entrenamiento (70%), conjunto de validación (15%) y conjunto de prueba o test (15%).

Los datos procedentes del análisis sensorial para los tres grupos de jamones analizados (100% ibérico montanera, ibérico montanera e ibérico pienso), se ven influidos por la alimentación y por la genética del animal de forma significativamente diferente. Mientras que la alimentación tiene una notable influencia en parámetros

como olor a cerdo, olor a curado, retrogusto y dulzor, la genética parece tener una mayor influencia sobre la intensidad de olor, rancidez, sabor a grasa y sabor atípico.

Por otro lado, el estudio de las características espectrales permitió establecer correlaciones entre las longitudes de onda del rango espectral estudiado y diferentes moléculas y grupos funcionales relacionados con los parámetros sensoriales.

La bonanza de las redes se estableció a partir del Coeficiente de Determinación (R^2) entre los valores esperados y los observados. Los resultados muestran que el algoritmo LM demostró ser el único capaz de entrenar redes predictoras para todos los parámetros sensoriales. Además, proporcionó mayor número de redes con $R^2 > 0,72$ por lo que se considera que es el más adecuado para entrenar ANN predictoras de parámetros sensoriales en jamón ibérico. Los resultados revelan que el parámetro que obtuvo un mayor número de redes con los mejores resultados de predicción fue la heterogeneidad (26,4% de las redes), seguido de los parámetros de acidez (13,4%), sabor atípico (9,5%) y olor (7,0%).

Por otro lado, se ha comprobado que cuanto mayor es el número de ensayos realizados, menor es el número de neuronas en la capa oculta que serían necesarias para obtener valores óptimos de R^2 . No obstante, el comportamiento de la red depende en gran medida de la inicialización previa de pesos y sesgos, lo que explica que algunos parámetros obtuviesen la mejor red en los 30 o 100 primeros ensayos. En cuanto a los mejores resultados de predicción para cada atributo sensorial, se obtuvieron valores para R^2 entre 0,51 (aroma a cerdo) y 0,82 (intensidad de sabor), con valores bajos para los parámetros de acidez y chiclosidad (0,58) y aroma atípico (0,59) y altos para los parámetros de grasosidad (0,74), fibrosidad (0,75), jugosidad (0,78) y retrogusto y sabor a rancio (0,8). Los Errores Cuadráticos Medios (MSE) observados entre los valores del panel de cata y las salidas de la ANN variaron entre 0,0196 (aroma atípico) y 0,5878 (veteado).

Article

Prediction of Sensory Parameters of Cured Ham: A Study of the Viability of the Use of NIR Spectroscopy and Artificial Neural Networks

Pedro Hernández-Ramos ¹, Ana María Vivar-Quintana ^{2,*} , Isabel Revilla ² ,
María Inmaculada González-Martín ³, Miriam Hernández-Jiménez ²  and
Iván Martínez-Martín ²

¹ Graphic Expression in Engineering, University of Salamanca, Escuela Politécnica Superior de Zamora, Avenida Requejo 33, 49022 Zamora, Spain; pedrohde@usal.es

² Food Technology, University of Salamanca, Escuela Politécnica Superior de Zamora, Avenida Requejo 33, 49022 Zamora, Spain; irevilla@usal.es (I.R.); miriamhj@usal.es (M.H.-J.); ivanm@usal.es (I.M.-M.)

³ Analytical Chemistry, Nutrition and Bromatology, University of Salamanca, Calle Plaza de los Caidos s/n, 37008 Salamanca, Spain; inmaglez@usal.es

* Correspondence: avivar@usal.es

Received: 9 September 2020; Accepted: 28 September 2020; Published: 1 October 2020



Abstract: Dry-cured ham is a high-quality product owing to its organoleptic characteristics. Sensory analysis is an essential part of assessing its quality. However, sensory assessment is a laborious process which implies the availability of a trained tasting panel. The aim of this study was the prediction of dry-ham sensory characteristics by means of an instrumental technique. To do so, an artificial neural network (ANN) model for the prediction of sensory parameters of dry-cured hams based on NIR spectral information was developed and optimized. The NIR spectra were obtained with a fiber-optic probe applied directly to the ham sample. In order to achieve this objective, the neural network was designed using 28 sensory parameters analyzed by a trained panel for sensory profile analysis as output data. A total of 91 samples of dry-cured ham matured for 24 months were analyzed. The hams corresponded to two different breeds (Iberian and Iberian x Duroc) and two different feeding systems (feeding outdoors with acorns or feeding with concentrates). The training algorithm and ANN architecture (the number of neurons in the hidden layer) used for the training were optimized. The parameters of ANN architecture analyzed have been shown to have an effect on the prediction capacity of the network. The Levenberg–Marquardt training algorithm has been shown to be the most suitable for the application of an ANN to sensory parameters

Keywords: cured ham quality; artificial neural network (ANN); near-infrared spectroscopy (NIR); sensory analysis

1. Introduction

Spanish Iberian dry-cured ham is defined by Spanish regulations in Royal Decree 4/2014 (BOE, 2014) as a product produced from the rear limbs of adult pigs with leg and bone subject to the corresponding process of salting and curing-maturation. This product is designated according to its type of genetic purity as “100% Iberian ham” in the case of products from animals with 100% genetic purity of the Iberian breed, and “Iberian ham” in the case of products from animals with at least 50% of their genetic makeup corresponding to the Iberian breed of pig as a result of crossing Iberian mothers with Duroc fathers. As far as the food of the pigs is concerned, hams may be denominated: “acorn-fed” for products from animals slaughtered immediately after feeding exclusively on acorns, grass, and other natural resources of the dehesa pastureland (this feeding system is known as “montanera”), or “fodder-fed” in

the case of animals fed on fodder consisting essentially of cereals and leguminous plants, which is handled in intensive exploitation systems.

The organoleptic and nutritional characteristics of Spanish Iberian ham make it a high-quality product which is considered a delicatessen food. There is extensive literature describing the sensory properties of dry-cured ham [1–4] and more recently even the emotions evoked during the consumption of dry-cured ham have been identified [5]. In order to carry out the sensory analysis of a cured ham, the presence of a trained panel is necessary owing to the number and complexity of the parameters that must be assessed. If the panel is to be suitable, it is necessary to select and train the assessors [4] and to validate the panel regularly to ensure that its members produce trustworthy results [6–8]. The validation of a panel requires the holding of controlled sampling sessions which allow the calculation of various indexes of repeatability, precision, and deviation by the assessors [4]. In the food industry, the sensory information of a product is essential, but it is very difficult and time-consuming to implement a suitably trained and validated sampling panel [9,10]. A system allowing the measuring of the sensory quality of a food in an objective manner, without the need for a sampling panel, would reduce the variability associated with human perception and the time needed for carrying out this kind of analysis [11].

It would be of great interest to be able to replace sensory evaluation with faster and simpler instrumental analysis. In this way, near-infrared spectroscopy (NIRS) is an objective and non-destructive method that has been used to predict the quality parameters of different foodstuffs and it had been evaluated for being implemented in dry-cured ham manufacture [12]. This method can be very useful for testing bulk material with little or no sample preparation. The chemical profile obtained by NIR can be successfully linked to specific sensory attributes for expanded snacks [13], for the evaluation and classification of cooked ham [14], for the prediction of lamb meat tenderness assessed by sensory analysis [15], and for the prediction of some quality defects of dry-cured ham samples [16].

However, as NIRS data requires complex statistical treatment, chemometrics has become an established technique for handling this type of data. Among chemometric methods, artificial neural networks (ANNs) are a well-known mathematical tool which is widely used together with the NIR technique in the case of many problems in meat production and technology such as the quality control of raw material, meat processing, shelf-life evaluation, detecting off-flavors, or authenticity assessment [17]. Artificial intelligence methods were mainly investigated for the assessment of meat sensory qualities such as the tenderness, color, or marbling score/level [18]. In relation to dry-cured ham, ANNs have been used for the classification of hams according to the maturation time [19], the identification of feeding and the ripening time of ham [20], and for the assessment of the curing of hams [21]. To our knowledge, there is no data in the literature on the prediction of sensory attributes in dry-cured ham based on NIR information by ANNs.

Taking into account the economic importance of dry-cured ham, the prediction of its sensory characteristics by means of a rapid instrumental technique is an interesting challenge. The aim of this study was to examine the feasibility of using artificial neural networks for predicting ham sensory parameters. Several algorithms, the number of neurons in the hidden layer, and the initial configuration have been tested in order to ascertain the best ANN architecture for predicting the sensory parameters.

2. Materials and Methods

2.1. Samples

A total of 91 samples of cured ham were analyzed. All the samples were of the fat-marbled part known as “la maza” which is the largest and tastiest part of the ham. The samples were obtained by cutting with a knife along a line passing through the thickest part of dry-cured hams as described by González-Casado et al. [4]. The production and maturation of the samples was carried out in Guijuelo in the province of Salamanca in the traditional manner over 24 months. The ham samples were selected to represent the greatest possible variability within products denominated Spanish Iberian dry-cured ham. Hams were therefore analyzed from pigs with “100% Iberian” genetics together with hams

denominated “Iberian” from animals with at least 50% of their genetic makeup corresponding to the Iberian breed of pig, obtained from crossing Iberian mothers with Duroc fathers. The samples analyzed included hams from the montanera, from animals fattened extensively with acorns and pasture for 90 days prior to slaughter, and fodder-fed ham from animals fed on commercial feed and pasture in an extensive system. In keeping with these parameters the distribution of the samples analyzed was as follows: 13 samples from 100% Iberian animals fed in montanera (IM), 53 samples of Iberian animals fed in montanera (CM), and 25 samples of fodder-fed Iberian animals (CC).

Once they have been cut the samples are vacuum-packed until they come to be analyzed. The packages were opened 1 h before being tested by the panel.

2.2. Sensory Evaluation

Ten assessors (aged from 20 to 50) participated in the study. All of them had previous experience in quantitative descriptive analysis (QDA) of dry-cured hams and were staff at the University of Salamanca. The training was carried out by using products of reference so as to stimulate the generation of terminology during 5 sessions. The assessors did not discuss data, terminology, or samples after each taste session; feedback was provided by the facilitator based on the statistical analysis of the taste session data [22]. The attributes selected for visual appearance, flavor, and texture description of the sample are shown in Table 1. A structured scoring scale was used in which 0 indicated the absence and 9 the high intensity of the attribute. The accuracy of the panel was assessed by studying its reproducibility and repeatability as a whole according to the methodology described by Pérez-Elortondo et al. [23]. To do this, the same ham is analyzed twice in the same session and again in a later session.

Four samples per session were analyzed and a total of 25 sessions were held. Samples were coded with three-digit random numbers and individually presented to the assessor. The average score of the ten assessors for each sample was recorded and used in the statistical analysis. In order to analyze the data, a two-way ANOVA and a post-hoc test (Tukey) were carried out to check for significant differences between samples. In order to investigate the relationship between the two attributes, the Pearson correlation coefficients have been calculated.

Table 1. Sensory parameters selected by the assessors and the definition of sensory parameters.

Parameter	Description	Score Criteria	
Visual			
Veined	Amount of intramuscular fat	0	9
Fat color	Color shade of the intramuscular fat	Absence of intramuscular fat	Large amount of intramuscular fat
Color homogeneity	Presence or absence of the various shades	Yellow	White
Color intensity	Color intensity of the item	Inhomogeneous	Homogeneous
Exudate	Shine from the separation of fat on the surface	Pink	Red
White dots	Presence of white dots owing to the precipitation of tyrosine	Absence of exudate	High intensity of exudate
		Absence of white dots	Large number of white dots
Flavor			
Odor	Intensity of odor before eating	Low intensity of odor	High intensity of odor
Cured aroma	Odor of cured meat	Low intensity of cured aroma	High intensity of cured aroma
Pig aroma	Odor of abattoir or recently slaughtered pig	Absence of pig aroma	High intensity of pig aroma
Rancidity aroma	Intensity of rancid odor	Low intensity of rancid odor	High intensity of rancid odor
Atypical aroma	Presence of strange odors uncharacteristic of ham	Absence of atypical aroma	High intensity of atypical aroma
Flavor intensity	Sensation of flavors once the product has been placed in the mouth	Low intensity of flavor	High intensity of flavor
Fat flavor intensity	Flavor intensity of the fat fraction	Low intensity of fat flavor	High intensity of fat flavor
Cured flavor	Intensity of cured flavor	Low intensity of cured flavor	High intensity of cured flavor
Saltiness	Intensity of salty taste	Low intensity of saltiness	High intensity of saltiness
Sweetness	Intensity of sweet taste	Low intensity of sweetness	High intensity of sweetness
Sourness	Intensity of acid taste	Low intensity of sourness	High intensity of sourness
Rancidity	Intensity of rancid flavor	Low intensity of rancid flavor	High intensity of rancid flavor
Aftertaste	Persistence of the taste after having eaten the product	Low intensity of aftertaste	High intensity of aftertaste
Atypical flavor	Presence of strange odors uncharacteristic of ham	Absence of atypical flavor	High intensity of atypical flavor
Texture			
Hardness	Firmness perception during chewing	Low intensity of firmness	High intensity of firmness
Juiciness	Impression of juiciness during chewing	Low intensity of juiciness	High intensity of rancid odor
Fatness	Appearance of a fatty sensation when chewing the product	Low intensity of fatness	High intensity of fatness
Fibrousness	Perception of fibers during chewing	Low number of fibers	High number of fibers
Chewiness	No. of bites necessary before the item is swallowed	Few bites	Many bites
Gumminess	Tendency to form a ball when the product is chewed	Low intensity of gumminess	High intensity of gumminess
Heterogeneity	Presence or absence of different textures in the item on chewing it	Homogeneity	Lack of homogeneity
Chewing Residue	If remains of the product stay in the mouth once we have swallowed it	Little or no residue	Large amount of residue

2.3. NIR-Chemometric Methods

The near-infrared spectra of the samples were obtained using a Foss NIRSystem 500 (Hillerød, Denmark). This equipment was coupled with a fiber-optic probe (1.5 m 210/210, Ref. No. R6539-A) and a 5 cm × 5 cm window quartz. The window was applied to the surface of ham directly without any preparation. The Foss NIRSystem 500 is equipped with four reflectance detectors (PBs elements) that, in order to minimize the specular reflectance, are placed at a 45° angle to the sample surface. The reference of the probe is a ceramic plate. The spectra of the sample were recorded in the 1100–2000 nm range at intervals of 2 nm, which means that a total of 451 pieces of reflectance data were obtained for each sample. The spectra above 2000 nm were not recorded as the OH groups that may be present in the optical fiber produce a significant attenuation of the signal. For each recording, 32 scans were performed for both the reference and sample. Indeed, all the samples were analyzed in triplicate to minimize sampling errors. The spectra of each sample were averaged and the logarithm of the reciprocal of the reflectance values was calculated to transform it into absorbance ($A = \log 1/R$).

2.4. Artificial Neural Network

The multilayer perceptron (MLP) feedforward artificial neural network (ANN) was used for processing the absorbance values obtained. The 451 values of NIR absorbance feed the input layer which had 451 neurons. The hidden layer has a variable number of neurons between 1 and 30 depending on the sensory parameter predicted and used the hyperbolic tangent sigmoid function. The output layer used the pure linear transfer function and has only one neuron. This neuron shows the estimated value of one of the sensory parameters. The use of a known seed value number to randomly initialize the weight and bias matrix allows us the reproducibility of data [24]. The pairs of NIRS-sensory data, i.e., input-output data, were randomly divided for all ANNs into three sets as follows: training, validation, and test set that accounts for the 70%, 15%, and 15% of the data respectively. Then, 28 ANN architectures, one for each of the sensory parameters, were optimized. Tests were carried out with the Scaled Conjugate Gradient Backpropagation and Levenberg–Marquardt Backpropagation training algorithms. The Deep Learning Toolbox of MatLab (MathWorks®) in its R2018 version was the software used for all the tests.

3. Results

3.1. Sensory Analysis

Sensory analysis is referred to as the evaluating of perceptible characteristics or organoleptic properties of ham termed as “attributes”. The technique used for the sensory characterization of ham was the quantitative descriptive analysis (QDA), which is the technique most frequently used with training panels to describe the sensory properties of different types of dry-cured ham [25–27]. In the case of dry-cured ham, the sensory attributes are the result of the interaction between the quality of the fresh material and the biological changes which occur during the processing [28,29], which are influenced by both the technological process and the duration of the maturation [30]. The results obtained in the tasting sessions for each of the attributes described in this study can be seen in Table 2.

Table 2. Scores for each sensory attribute of dry-cured ham determined by the sensory panel and results of the statistical analysis of the influence of the feeding and the genetics of the animals.

Sensory Attribute	Mean			<i>p</i> -Value		
	IM *	CM **	CC ***	Feeding	Genetics	
Visual parameters	Veined	5.37 ^a	6.20 ^b	7.22 ^c	0.000	0.002
	Fat color	6.20 ^a	7.05 ^b	7.37 ^c	0.001	0.000
	Color homogeneity	6.78 ^a	7.00 ^a	6.82 ^a	0.308	0.313
	Color intensity	7.50 ^b	7.39 ^b	6.42 ^a	0.000	0.034
	Exudate	4.42 ^a	6.00 ^b	4.78 ^a	0.000	0.000
	White dots	1.13 ^a	2.56 ^b	0.85 ^a	0.000	0.017
Flavor parameters	Odor	6.34 ^a	6.88 ^b	6.50 ^a	0.019	0.001
	Cured aroma	6.82 ^b	7.04 ^c	6.61 ^a	0.000	0.414
	Pig aroma	0.25 ^a	0.20 ^{a,b}	0.33 ^b	0.007	0.871
	Rancidity aroma	0.79 ^b	0.49 ^a	0.63 ^{a,b}	0.235	0.004
	Atypical aroma	0.16 ^a	0.09 ^a	0.15 ^a	0.364	0.414
	Flavor intensity	6.60 ^a	7.34 ^b	6.69 ^a	0.000	0.000
	Fat flavor intensity	4.77 ^a	5.79 ^c	5.31 ^b	0.135	0.000
	Cured flavor	6.47 ^a	7.00 ^b	6.35 ^a	0.000	0.026
	Saltiness	5.03 ^a	4.98 ^a	5.16 ^a	0.139	0.963
	Sweetness	1.49 ^a	1.83 ^b	1.24 ^a	0.000	0.346
	Sourness	0.36 ^a	0.27 ^a	0.36 ^a	0.255	0.381
	Rancidity	1.48 ^b	0.94 ^a	1.01 ^a	0.711	0.000
	Aftertaste	6.23 ^a	6.73 ^b	6.02 ^a	0.000	0.074
	Atypical flavor	0.75 ^b	0.32 ^a	0.29 ^a	0.276	0.001
Texture parameters	Hardness	4.00 ^b	3.24 ^a	3.47 ^a	0.694	0.002
	Juiciness	5.16 ^a	5.47 ^b	6.02 ^c	0.007	0.000
	Fatness	4.78 ^a	5.50 ^b	5.15 ^{a,b}	0.229	0.004
	Fibrousness	2.93 ^{a,b}	2.53 ^a	3.30 ^b	0.000	0.474
	Chewiness	2.93 ^a	2.70 ^a	3.03 ^a	0.102	0.581
	Gumminess	1.70 ^a	1.48 ^a	1.55 ^a	0.855	0.366
	Heterogeneity	2.19 ^a	2.28 ^a	2.32 ^a	0.640	0.541
	Chewing Residue	1.80 ^b	1.24 ^a	1.61 ^b	0.068	0.013

* IM: 100% Iberian animals fed in “montanera”; ** CM: Iberian animals fed in “montanera”; *** CC: fodder-fed Iberian animals; ^{a,b,c}—Different letters in the same line indicate statistically significant differences ($p < 0.05$) between the three groups of ham samples.

As far as the appearance profile is concerned, the attributes of veined, fat color, color intensity, exudate, and white dots present statistically significant differences ($p < 0.05$) which depend on the type of ham analyzed. Hams from IM pigs therefore gave lower scores for the attributes of veineds, fat color, exudate, and white dots. For the first two attributes, the maximum scores corresponded to CC hams while for the exudate and white dots CM hams obtained the highest scores. For all these parameters both the feeding and genetics of the animals had a significant influence on the scores awarded by the samplers. All the samples analyzed in this study are from Iberian pigs, either 100% pure or crossed at 75 or 50%; a characteristic of this breed is a high intramuscular fat (IMF) content owing to both the rearing system and the genetic features of the pig breed [31]. The high content in muscular fat has been related to the veined and exudate parameters [32,33]. In this study, higher values of these parameters were found for crossbred samples (CM and CC). A higher color intensity was found in animals fed in montanera (IM and CM) related to greater exercise and to yellower fat which was probably due to the higher unsaturation of the fat. Color homogeneity is the only visual attribute which presents no significant differences between the groups. This attribute is more closely related to the dry-curing process, which includes the origin of the formation of compounds associated with the characteristic color of dry-cured meat products [34].

In relation to flavor, all parameters have shown statistically significant differences between the three groups of hams analyzed except for the parameters of atypical aroma, sourness, and saltiness. These parameters are associated with defects present in cured hams and appear to be related to the technological processes and maturation conditions of the product. CM hams showed the highest values of odor, flavor intensity, fat flavor intensity, cured flavor, sweetness, and aftertaste, while CC hams showed in general the lowest values of the same parameters with the exception of fat flavor intensity which was lower in IM hams.

The factors of feeding and genetics of the animal have a different influence according to the attributes; only odor, flavor intensity, cured flavor, and aftertaste presented significant differences for both factors. Therefore, feeding had a significant influence on the parameters of cured aroma, pig aroma, sweetness, and aftertaste while genetics had a significant influence regarding rancidity, aroma and flavor, fat flavor, and atypical flavor. Lipolysis and proteolysis are the main biochemical reactions involved in the generation of a wide range of volatile compounds [35,36]. The fat present in both the muscles and the subcutaneous tissue appears to be of great importance in the entire flavor of Iberian hams and means that the flavor of this type of product is highly complex. The volatile compounds which contribute towards the odor and flavor of dry-cured ham are mainly generated during the maturation process from the oxidation of the fatty acids and Maillard reactions [37]. To a lesser extent, volatile compounds are formed from mold and yeast and Iberian ham has a particularly high concentration [38]. There are also a small number of compounds which are directly accumulated in pig fat deposits from feeding [39], which would justify the low number of parameters with significant differences which can be directly attributed either to the different genetic purity or to the feeding system of the pigs.

The results obtained in the texture parameters show that chewiness, gumminess, and heterogeneity are the only attributes which do not present significant differences in the scores awarded by the assessors for the three groups of hams analyzed. IM hams have the lowest scores in the attributes of juiciness and fatness and the highest in the attributes of hardness and chewing residue. High intramuscular fat (IMF) content thus appears to have a very remarkable effect on the texture of dry-cured ham [32], increasing the juiciness and decreasing the hardness and fibrousness [32,39]. In our study, we found a correlation between the veined and texture parameters. The lower the veined value the lower the juiciness and fatness and the higher the hardness. During the processing of dry-cured ham proteolysis, that is affected by an important number of factors such as pH of fresh ham, anatomic location, temperature, water, or salt content [40–42], is one of the main biochemical reactions. In fact, proteolysis is considered to be the major contributor to texture changes [43,44].

Previous studies suggest that the color of Spanish dry-cured hams has a strong correlation with their texture [45]. From our results, a negative correlation (at the 0.01 level) can be observed between the attributes of color fat and color homogeneity and the parameters of texture: hardness, chewiness, gumminess, heterogeneity and chewing residue. Likewise, they show a positive correlation with the fatness attribute. For its part, the color intensity attribute presents no correlations with any of the texture parameters analyzed.

3.2. Spectral Characteristics

In the ham samples analyzed by the assessors, the register of their spectra was carried out by using NIRS technology and a remote reflectance fiber-optic probe. The mean spectral curves of the registered samples are shown in Figure 1.

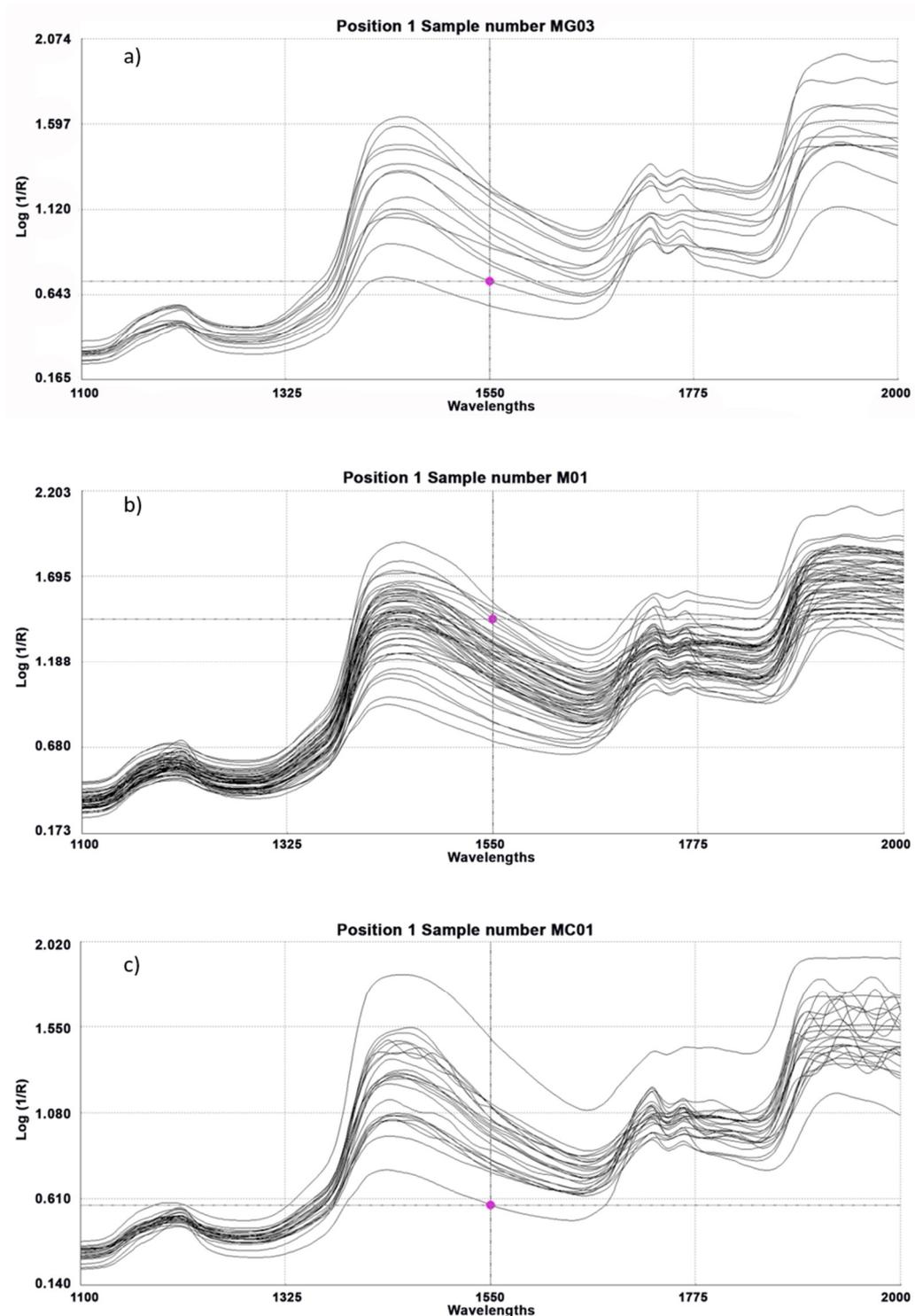


Figure 1. Near Infrared Spectroscopy (NIR) spectra obtained from a remote reflectance fiber-optic probe applied directly to samples of ham. (a) 100% Iberian animals fed in “montanera2 (IM), (b) Iberian animals fed in “montanera” (CM) and (c) fodder-fed Iberian animals (CC).

The wavelengths responsible for the NIR are due to C-H stretching combinations with other vibrational modes, in addition to the strong absorptions shown by the molecules containing N-H, S-H, and P-H. In this way, the NIR spectra obtained allow us to establish a relationship between different chemical molecules and functional groups and the sensory parameters analyzed in the ham.

Group C-oil is therefore strongly related to the perception of the saltiness and fatness of the ham and group C-Cl is related to saltiness and rancidity. Group C-O-oil is related to the fibrousness of the product and group SH-SH is strongly related to texture parameters such as fibrousness, chewiness, and gumminess. In addition to these chemical groups which provide greater weight and higher correlation coefficients in the NIR predictive models, we have been able to relate other groups with some of the sensory attributes analyzed as is shown in Table 3.

Table 3. Sensory attributes for which it has been possible to establish a relationship with the spectral wavelengths and the chemical groups responsible for the perception of this attribute.

Sensory Attribute	Wavelength (nm)	Chemical Structure and Functional Groups
Fat color	1362	CH ₃
	1460	Urea, Starch, Amides
	1536	Amides
	1772	Cellulose
Cured aroma	1510	Protein
	1620	=CH ₂
	1770	Cellulose
	1954	Aromatic ester
Rancidity aroma	1450	Water, Ketone, Starch
	1512	Protein
	1922	Cellulose, Starch
Atypical aroma	1458	Amides
	1482	Amides, Aromatic amides, Cellulose, Urea, Aromatic amines
	1622	=CH ₂
Cured flavor	1416	CH-aromatic compounds
	1512	Protein
	1882	Cellulose
	1982	Amides
Saltiness	1406	H ₂ O
	1416	C-Oil *, ROH-H ₂ O
	1446	CH ₂ , aromatic compounds, starch
	1488	Cellulose, Amines, Aromatic amines
	1520	Urea
	1686	Aromatic compounds
	1866	C-Cl *
Sourness	1950	Aromatic amides
	122	CH ₂
Rancidity	1538	Starch
	1390	CH ₂
	1454	Starch
	1506	-NH, Protein
	1528	Aromatic amines
	1682	C-Cl *

Table 3. Cont.

Sensory Attribute	Wavelength (nm)	Chemical Structure and Functional Groups
Hardness	1416	OH-H ₂ O, Alcohol/aromatic compounds
	1502	Amines
	1518	Urea
	1530	Aromatic amines
Juiciness	1162	C=O
	1452	Starch
	1772	Cellulose
Fatness	1162	C=O
	1488	CONHR, Amides, Aromatic amines
	1520	Urea
	1720	CO-Oil *
Fibrousness	1148	CH ₂ aromatic compounds
	1518	Urea
	1528	R-NH ₂
	1722	C-O-Oil *
	1736	SH- SH- *
	1928	Cellulose, Starch
	1956	Second overtone of CO ₂ R
Chewiness	1218	-CH ₂
	1458	Starch
	1490	Amides, Urea, Aromatic amines, Starch, Cellulose
	1514	Protein
	1736	SH- SH- *
Gumminess	1488	CONR, Cellulose, Urea
	1504	Amines
	1526	Aromatic amines
	1736	SH- SH- *
	1746	SH- *
	1928	Cellulose, Starch
Heterogeneity	1510	Protein
	1534	R-N H ₂
	1922	Cellulose
Chewing Residue	1218	CH-CH ₂
	1514	Protein
	1530	Aromatic amines
	1618	=CH ₂

* Chemical structure and functional groups which have greater weight in the NIR models for predicting sensory attributes

3.3. Artificial Neural Network (ANN)

The results obtained in the sensory analysis of the hams presented in this study allow the availability of sufficiently heterogeneous products, owing to which we have a satisfactory sample for

assessing the application of neuronal networks in the prediction of the same. ANNs become useful in those cases in which the rules underlying the data are unknown or only partially known [17].

The neural networks tested were constructed by using the NIR spectra and the sensory parameters such as input and output data respectively. The diagram of the network structure used is shown in Figure 2.

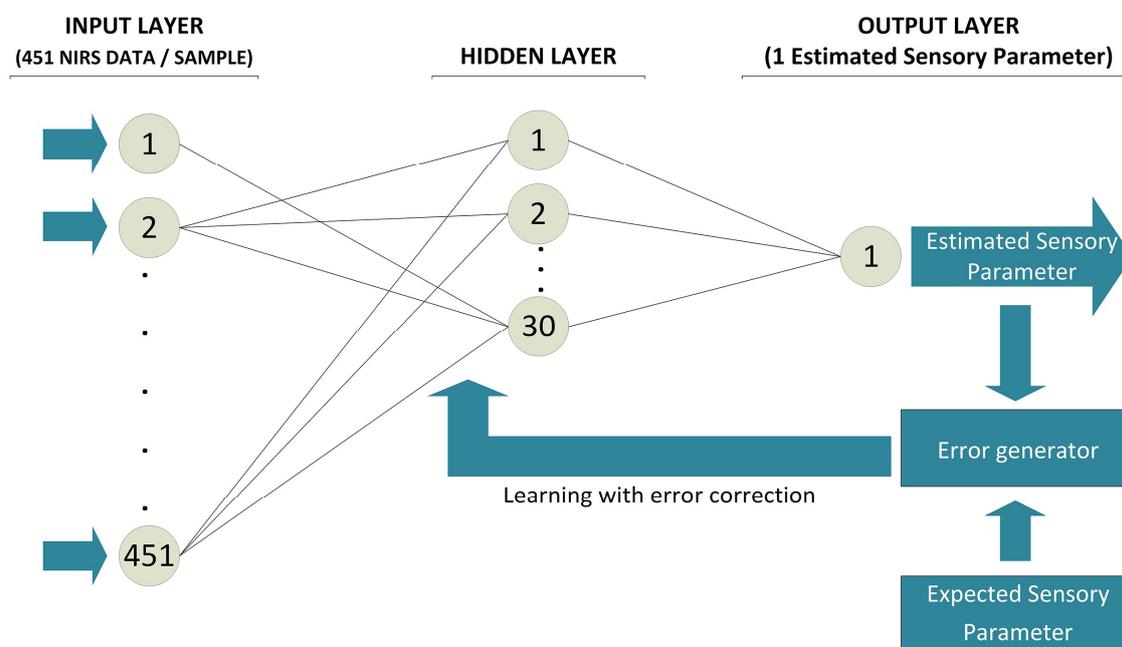


Figure 2. Structure of feedforward multi-layer Artificial Neuronal Network (ANN) for calculating sensory parameters of cured ham; this diagram is repeated for each of the 28 sensory parameters studied.

The input data were the values obtained from NIR spectra. A total of 451 reflectance data for each sample, corresponding to the 451 log 1/R values obtained between 1100 and 2000 nm were measured every 2 nm. In turn, each register is the result of the measurement of the NIR spectrum at 32 different points of that sample. As output data, we used the average values of the sensory parameters provided by the assessors for each of the sensory parameters analyzed.

Although the ANN technique has many advantages, model users always spend a great deal of time and effort in the process of parameter training. Identifying the optimum parameters of ANNs can help us avoid an unnecessary waste of time and effort [46]. For this reason, an attempt was made to assess the training algorithm and the network architecture in order to predict dry-cured ham sensory analysis. The ANN training algorithms Scaled Conjugate Gradient (SGC) and Levenberg-Marquardt (LM) were examined. For each of them between 1 and 30 neurons were tested in the hidden layer. In total 1500 networks were analyzed, 30 different values of neurons in the hidden layer with 50 different initial states for each of them. The suitability of the networks obtained was established from the value R^2 (the R-square between the target and the estimated parameter). For each sensory parameter, the networks with a value exceeding $R^2 > 0.72$ in the test set were taken into account, which gives an idea of the number of networks generated with the capacity for predicting this parameter. The results obtained reveal that the parameter with the largest number of networks capable of predicting it were heterogeneity (26.4% of the networks) followed by the parameters of sourness (13.4%), atypical flavor (9.5%), and odor (7.0%). The LM training algorithm allowed the finding of networks for the prediction of all the sensory parameters and was the one providing the largest number of networks with $R^2 > 0.72$.

The number of neurons in the hidden layer should be between the input and the output layer size and be determined empirically [47,48]. Networks with from 1 to 30 neurons and three different number of training times (30, 100, and 500) were tested. Table 4 shows the number of neurons providing the

best ANN architecture (in terms of obtaining the highest R^2) for each number of training times assessed. The results show that when the training times increase the number of neurons in the hidden layer necessary for obtaining the network with the highest R^2 falls, in such a way that in the case of 100 and 500 training times it will not be necessary to test a number of neurons higher than 10 in the hidden layer. The optimum number of neurons in the hidden layer and training times was different for each of the sensory parameters analyzed in the ham. Owing to the variability of the results it was decided to assess the sensitivity of the parameters of ANN architecture. Following the model proposed by [46] to identify the sensitivity of parameters of ANN architecture, the sensitivity index (S) was calculated.

Table 4. ANN architecture (training times and the number of neurons in the hidden layer) for each of the sensory parameters analyzed.

Sensory Attribute	The Best ANN Architecture (Higher R^2 Value)	
	No. of Neurons in the Hidden Layer	No. of Training Times
Veined	6	500
Fat color	17	30
Color homogeneity	8	100
Color intensity	1	500
Exudate	6	500
White dots	3	500
Odor	10	500
Cured aroma	10	500
Pig aroma	27	30
Rancidity aroma	25	30
Atypical aroma	6	500
Flavor intensity	1	500
Fat flavor intensity	9	500
Cured flavor	6	500
Saltiness	7	500
Sweetness	23	30
Sourness	10	500
Rancidity	8	500
Aftertaste	27	30
Atypical flavor	3	100
Hardness	9	500
Juiciness	4	100
Fatness	7	500
Fibrousness	7	100
Chewiness	6	100
Gumminess	9	500
Heterogeneity	3	500
Chewing Residue	1	500

Our results show that there is a direct relationship between the number of neurons in the hidden layer and the number of training times and the R^2 for all the parameters analyzed with the exception of the “rancidity aroma.” According to our results, 23 of the 28 estimated sensory parameters in dry-cured ham are more sensitive to the number of neurons in the hidden layer than the number of training times in ANN architecture. Only the visual color intensity parameter, the flavor intensity and atypical flavor parameters, and the juiciness and chewing residue texture parameters show more sensitivity to the training times.

Once the best network architecture had been established, the sensory parameters of dry ham were predicted. Figures 3–5 show the prediction graphs and the R^2 values and the adjustment lines obtained. The R^2 values obtained vary between 0.51 for the pig aroma parameter to 0.82 for the flavor intensity parameter.

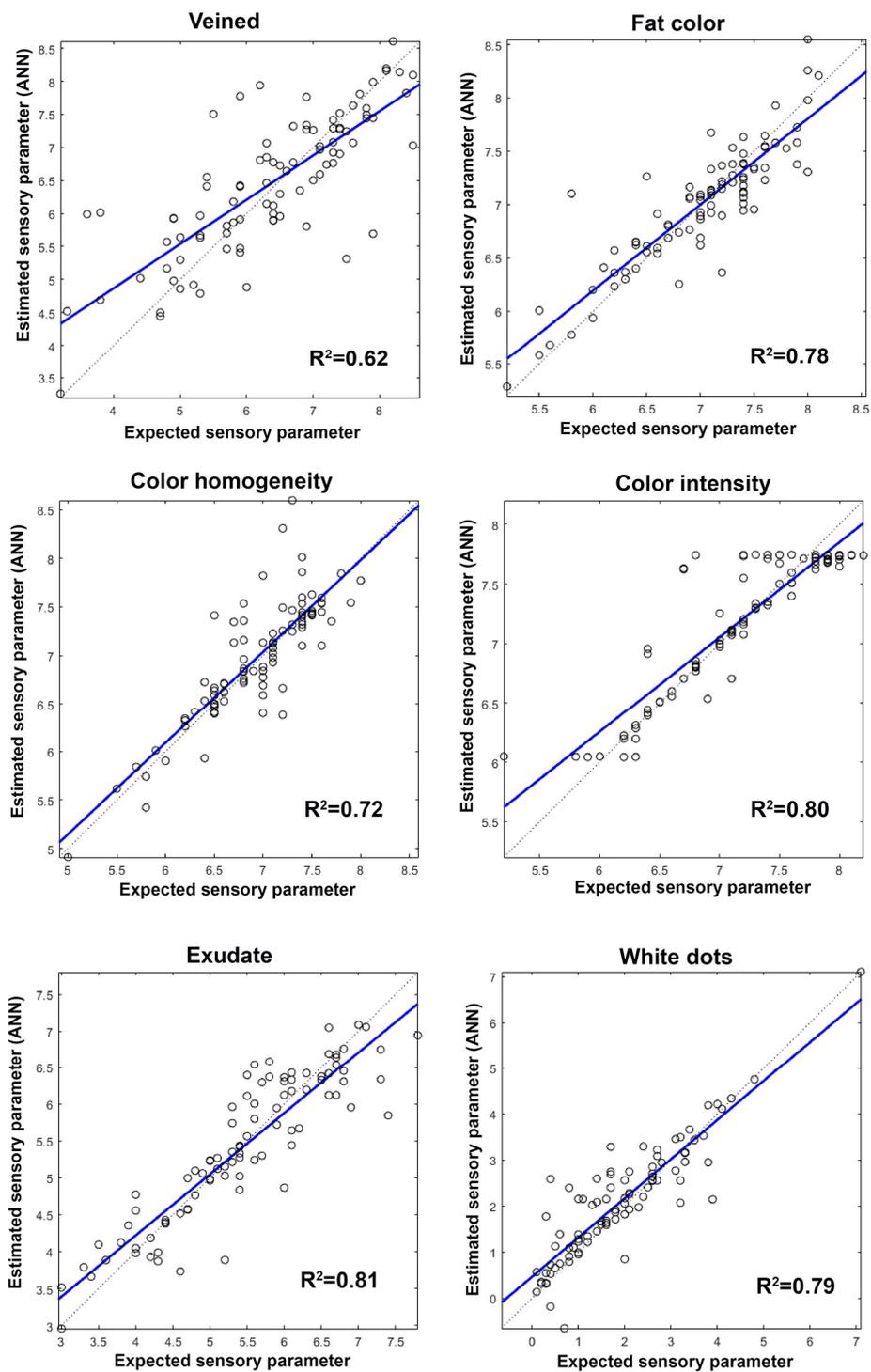


Figure 3. Comparison of the reference values (target) with the values predicted by ANNs for visual parameters and R^2 .

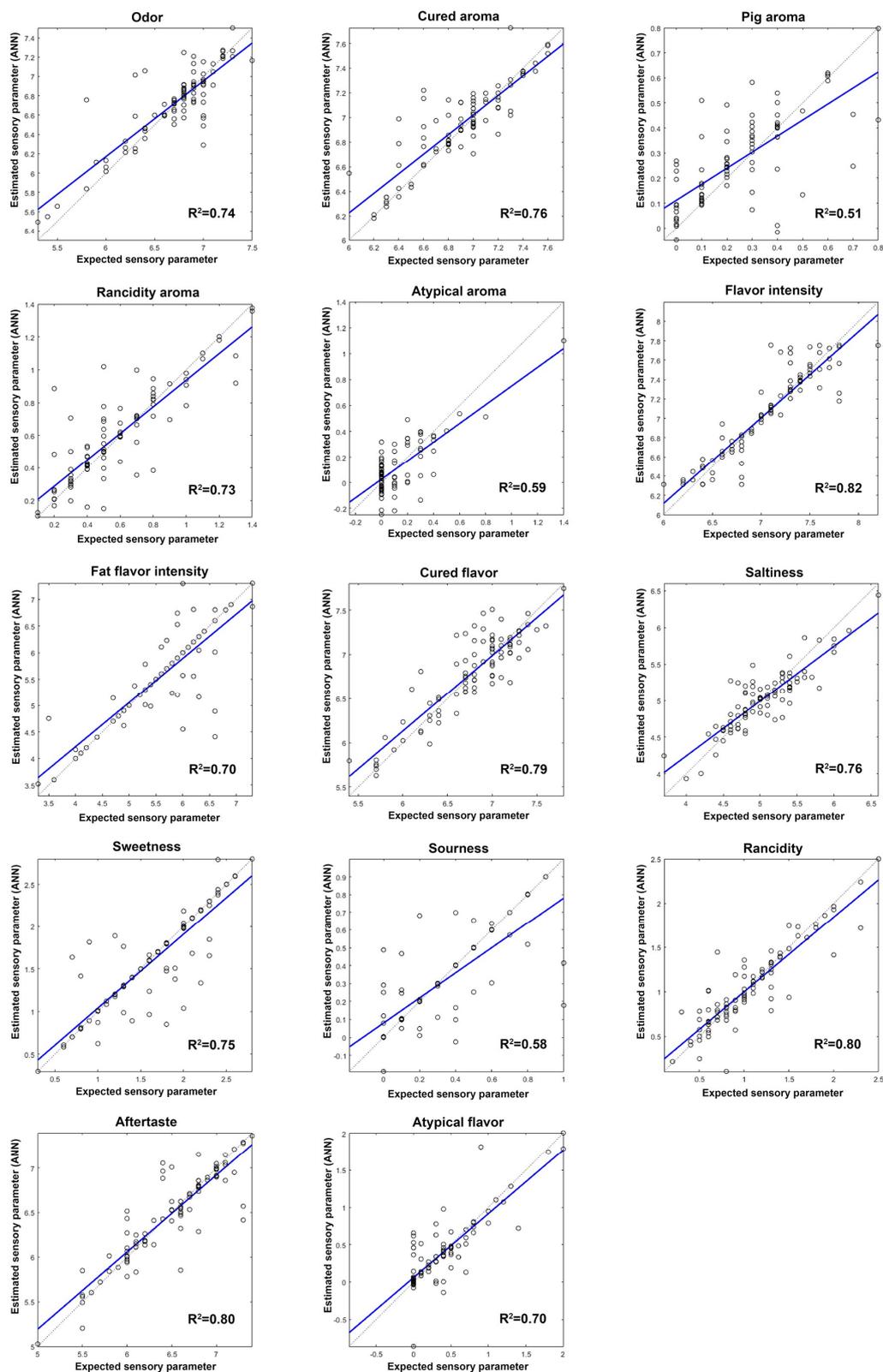


Figure 4. Comparison of the reference values (target) with the values predicted by ANNs for flavor parameters and R^2 .

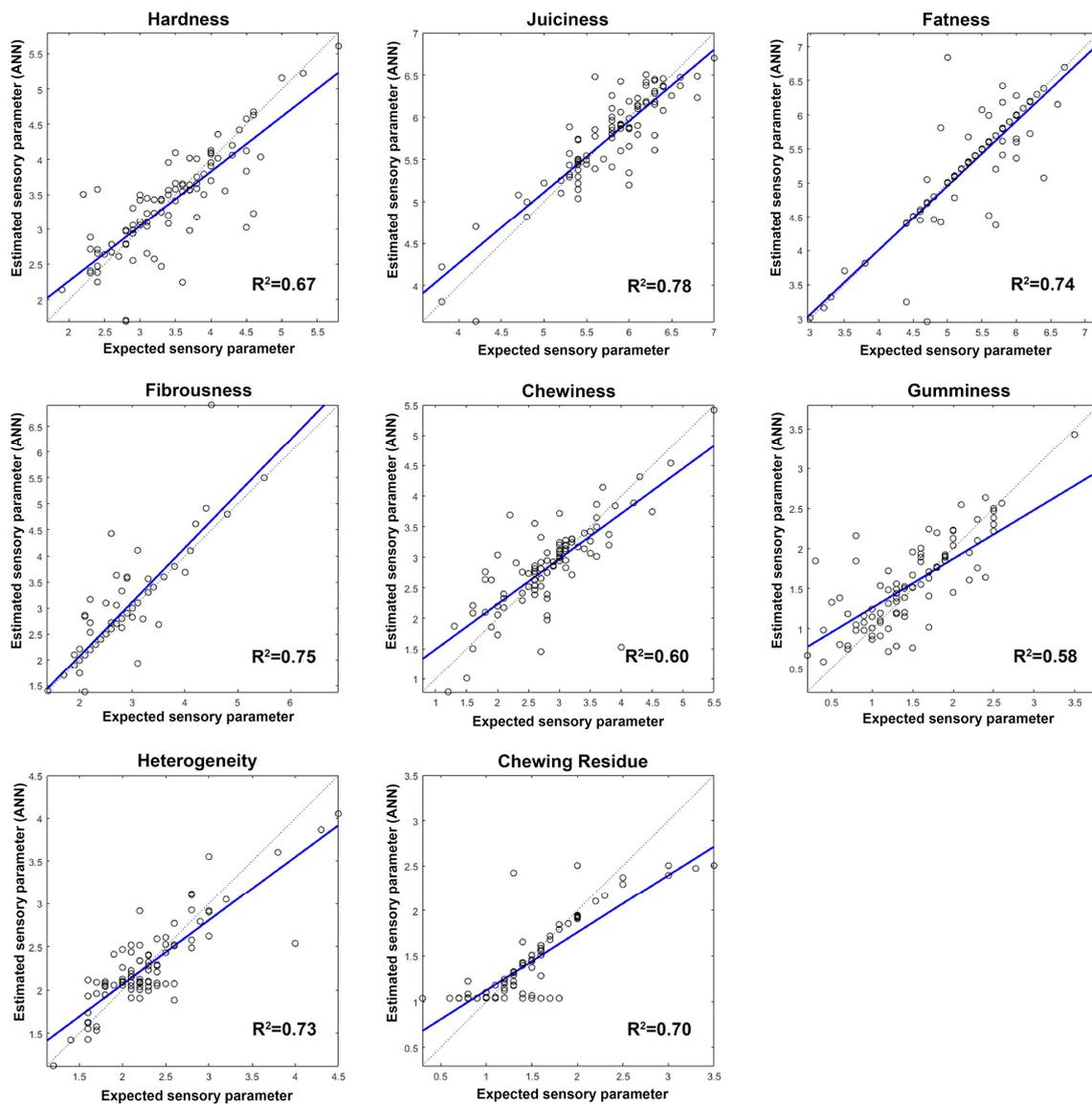


Figure 5. Comparison of the reference values (target) with the values predicted by ANNs for texture parameters and R^2 .

As far as the appearance profiles (Figure 3) are concerned, all of them show a satisfactory correlation between the target and the values predicted by the network. In relation to the odor and flavor of dry-cured hams (Figure 4), the values with the highest correlation were aftertaste, rancidity, and flavor intensity. The results obtained for the texture parameters (Figure 5) show that juiciness, fatness, and fibrousness provide the networks with the best adjustments. Of the 28 sensory parameters analyzed no relation was found between the prediction capacity of the network and the significant differences in the values given by the assessors, whether owing to the purity effect of the breed or to the feeding effect.

The prediction network generated was further tested with 14 samples of ham (a set test) which were neither part of the training nor the validation set. The mean squared errors (MSEs) between the targets and the ANN outputs were assessed (Table 5). The MSEs found varied between 0.0196 and 0.5878; the highest errors occurred in the prediction of the texture and visual parameters. The best results in the prediction of sensory parameters were obtained for the parameters related to flavor. The lower prediction capacity of the network could be seen in the attributes of pig aroma, atypical aroma, sourness, and gumminess with an R^2 between 0.51 and 0.59 (Figures 4 and 5). However,

when the network generated was checked against the set test the number of errors made by the network in the prediction of these parameters is low. The values obtained in all the sensory parameters analyzed suggest that the network generated can be applied satisfactorily to unknown samples.

Table 5. The best ANN architecture and the mean square error of prediction (MSE) for each of the sensory parameters, obtained in the test set.

Sensory Attribute	No. of Neurons in the Hidden Layer	No. of Training Times	MSE
Veined	6	500	0.587
Fat color	17	30	0.088
Color homogeneity	8	100	0.110
Color intensity	1	500	0.081
Exudate	6	500	0.216
White dots	3	500	0.374
Odor	10	500	0.047
Cured aroma	10	500	0.031
Pig aroma	27	30	0.020
Rancidity aroma	25	30	0.025
Atypical aroma	6	500	0.019
Flavor intensity	1	500	0.039
Fat flavor intensity	9	500	0.216
Cured flavor	6	500	0.053
Saltiness	7	500	0.054
Sweetness	23	30	0.078
Sourness	10	500	0.029
Rancidity	8	500	0.044
Aftertaste	27	30	0.053
Atypical flavor	3	100	0.066
Hardness	9	500	0.204
Juiciness	4	100	0.077
Fatness	7	500	0.183
Fibrousness	7	100	0.205
Chewiness	6	100	0.242
Gumminess	9	500	0.207
Heterogeneity	3	500	0.086
Chewing Residue	1	500	0.107

4. Conclusions

The results obtained in this study allow us to conclude that NIR spectral information and the application of ANNs could be an interesting tool for predicting the sensory parameters of dry-cured hams. The sensory analysis of ham requires a great investment of time and a trained panel to carry it out. With the methodology proposed it would be possible to predict the sensory parameters of the ham at the same time as it is sliced. The results showed that these models have the ability to predict the most important sensory parameters for dry-cured ham with relatively high accuracy. Future studies with greater heterogeneity of samples will be necessary to improve the results obtained for some sensory parameters.

Author Contributions: Conceptualization, I.R. and A.M.V.-Q.; methodology, M.I.G.-M.; validation, M.H.-J. and P.H.-R.; writing—original draft preparation, M.I.G.-M.; writing—review and editing, I.R. and A.M.V.-Q.; visualization, I.M.-M.; supervision project administration, I.R. All authors have read and agreed to the published version of the manuscript.

Funding: This study was made possible by the funds jointly provided for the research project by the Junta de Castilla and León and the European Regional Development Fund (SA039P17).

Conflicts of Interest: The authors declare no conflict of interest.

References

1. Ventanas, S.; Ventanas, J.; Ruiz, J. Sensory characteristics of Iberian dry-cured loins: Influence of crossbreeding and rearing system. *Meat Sci.* **2007**, *75*, 211–219. [[CrossRef](#)]
2. Guàrdia, M.D.; Aguiar, A.P.S.; Claret, A.; Arnau, J.; Guerrero, L. Sensory characterization of dry-cured ham using free-choice profiling. *Food Qual. Prefer.* **2010**, *21*, 148–155. [[CrossRef](#)]
3. Llorido, L.; Hort, J.; Estévez, M.; Ventanas, S. Reporting the sensory properties of dry-cured ham using a new language: Time intensity (TI) and temporal dominance of sensations (TDS). *Meat Sci.* **2016**, *121*, 166–174. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
4. González-Casado, A.; Jiménez-Carvelo, A.M.; Cuadros-Rodríguez, L. Sensory quality control of dry-cured ham: A comprehensive methodology for sensory panel qualification and method validation. *Meat Sci.* **2019**, *149*, 149–155. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
5. Llorido, L.; Pizarro, E.; Estévez, M.; Ventanas, S. Emotional responses to the consumption of dry-cured hams by Spanish consumers: A temporal approach. *Meat Sci.* **2019**, *149*, 126–133. [[CrossRef](#)]
6. Dos Santos Navarro da Silva, R.C.; Rodrigues Minim, V.P.; Navarro da Silva, A.; Arruda Gonçalves, A.C.; Souza Carneiro, J.d.D.; Iamim Gomide, A.; Della Lucia, S.M.; Minim, L.A. Validation of Optimized Descriptive Profile (ODP) technique: Accuracy, precision and robustness. *Food Res. Int.* **2014**, *66*, 445–453. [[CrossRef](#)]
7. Elía, M. A Procedure for Sensory Evaluation of Bread: Protocol Developed by a Trained Panel. *J. Sens. Stud.* **2011**, *26*, 269–277. [[CrossRef](#)]
8. Carlucci, A.; Monteleone, E. Statistical validation of sensory data: A study on wine. *J. Sci. Food Agric.* **2001**, *81*, 751–758. [[CrossRef](#)]
9. Martens, H.; Martens, M. *Multivariate Analysis of Quality. An Introduction*; John Wiley & Sons Ltd.: Chichester, UK, 2001.
10. Thybo, A.; Bechmann, I.; Martens, M.; Engelsen, S. Prediction of sensory texture quality of cooked potatoes from the raw material using uniaxial compression, near infrared (NIR) spectroscopy and low field ¹H NMR spectroscopy using chemometrics. *Food Sci. Technol.* **2000**, *33*, 103–111. [[CrossRef](#)]
11. Iqbal, A.; Sun, D.-W.; Allen, P. An overview on principle, techniques and application of hyperspectral imaging with special reference to ham quality evaluation and control. *Food Control.* **2014**, *46*, 242–254. [[CrossRef](#)]
12. Pérez-Santaescolástica, C.; Fraeye, I.; Barba, F.J.; Gómez, B.; Tomasevic, I.; Romero, A.; Moreno, A.; Toldrá, F.; Lorenzo, J.M. Application of non-invasive technologies in dry-cured ham: An overview. *Trends Food Sci. Technol.* **2019**, *86*, 360–374. [[CrossRef](#)]
13. Ramos-Díaz, J.M.; Rinnan, Å.; Jouppila, K. Application of NIR imaging to the study of expanded snacks containing amaranth, quinoa and kañiwa. *LWT* **2019**, *102*, 8–14. [[CrossRef](#)]
14. Talens, P.; Mora, L.; Morsy, N.; Barbin, D.F.; ElMasry, G.; Sun, D.-W. Prediction of water and protein contents and quality classification of Spanish cooked ham using NIR hyperspectral imaging. *J. Food Eng.* **2013**, *117*, 272–280. [[CrossRef](#)]
15. Kamruzzaman, M.; ElMasry, G.; Sun, D.-W.; Allen, P. Non-destructive assessment of instrumental and sensory tenderness of lamb meat using NIR hyperspectral imaging. *Food Chem.* **2013**, *141*, 389–396. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
16. Ortiz, M.C.; Sarabia, L.; García-Rey, R.; Luque de Castro, M.D. Sensitivity and specificity of PLS-class modelling for five sensory characteristics of dry-cured ham using visible and near infrared spectroscopy. *Anal. Chim. Acta* **2006**, *558*, 125–131. [[CrossRef](#)]
17. Prevolnik, M.; Čandek-Potokar, M.; Novič, M.; Škorjanc, D. An attempt to predict pork drip loss from pH and colour measurements or near infrared spectra using artificial neural networks. *Meat Sci.* **2009**, *83*, 405–411. [[CrossRef](#)]
18. Prevolnik, M.; Škorjan, D.; Čandek-Potokar, M.; Novič, M. Application of Artificial Neural Networks in Meat Production and Technology. In *Artificial Neural Networks-Industrial and Control Engineering Applications*; Suzuki, K., Ed.; InTech: Rijeka, Croatia, 2011; pp. 223–240.
19. Prevolnik, M.; Andronikov, D.; Žlender, B.; Font-i-Furnols, M.; Novič, M.; Škorjanc, D.; Čandek-Potokar, M. Classification of dry-cured hams according to the maturation time using near infrared spectra and artificial neural networks. *Meat Sci.* **2014**, *96*, 14–20. [[CrossRef](#)]

20. Santos, J.P.; Garcia, M.; Aleixandre, M.; Horrillo, M.C.; Gutierrez, J.; Sayago, I.; Fernandez, M.J.; Ares, L. Electronic nose for the identification of pig feeding and ripening time in Iberian hams. *Meat Sci.* **2004**, *66*, 727–732. [[CrossRef](#)]
21. Gil-Sánchez, L.; Garrigues, J.; Garcia-Breijo, E.; Grau, R.; Aliño, M.; Baigts, D.; Barat, J.M. Artificial neural networks (Fuzzy ARTMAP) analysis of the data obtained with an electronic tongue applied to a ham-curing process with different salt formulations. *Appl. Soft Comput.* **2015**, *30*, 421–429. [[CrossRef](#)]
22. O’Sullivan, M.G.; Kerry, J.P. *Improving the Sensory and Nutritional Quality of Fresh Meat*; Woodhead Publishing Limited: Cambridge, UK, 2009; pp. 178–196.
23. Pérez Elortondo, F.J.; Ojeda, M.; Albisu, M.; Salmerón, J.; Etayo, I.; Molina, M. Food quality certification: An approach for the development of accredited sensory evaluation methods. *Food Qual. Prefer.* **2007**, *18*, 425–439. [[CrossRef](#)]
24. Pillonel, L.; Badertscher, R.; Casey, M.; Meyer, J.; Rossmann, A.; Schlichtherle-Cerny, H.; Tabacchi, R.; Bosset, J.O. Geographic origin of European Emmental cheese: Characterisation and descriptive statistics. *Int. Dairy J.* **2005**, *15*, 547–556. [[CrossRef](#)]
25. Cilla, I.; Martínez, L.; Beltrán, J.A.; Roncalés, P. Dry-cured ham quality and acceptability as affected by the preservation system used for retail sale. *Meat Sci.* **2006**, *73*, 581–589. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
26. García-González, D.L.; Roncales, P.; Cilla, I.; del Río, S.; Poma, J.P.; Aparicio, R. Interlaboratory evaluation of dry-cured hams (from France and Spain) by assessors from two different nationalities. *Meat Sci.* **2006**, *73*, 521–528. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
27. Rousset, S.; Martin, J.-F. An Effective Hedonic Analysis Tool: Weak/Strong Points. *J. Sens. Stud.* **2001**, *16*, 643–661. [[CrossRef](#)]
28. Arnau, J. Tecnología del jamón curado en distintos países. In *El Jamón Curado: Tecnología y Análisis de Consumo: Simposio Especial*, 44th ed.; Arnau, J.Y., Monfort, J.M., Eds.; Centro de Tecnología de la Carne (IRTA). Editorial Estrategias Alimentarias S.L.- EUROCARNE: Madrid, España, 1998; pp. 10–21.
29. Vestergaard, C.S.; Schivazappa, C.; Virgili, R. Lipolysis in dry-cured ham maturation. *Meat Sci.* **2000**, *55*, 1–5. [[CrossRef](#)]
30. Buscailhon, S.; Berdagué, J.L.; Bousset, J.; Cornet, M.; Gandemer, G.; Touraille, C.; Monin, G. Relations between compositional traits and sensory qualities of French dry-cured ham. *Meat Sci.* **1994**, *37*, 229–243. [[CrossRef](#)]
31. Mayoral, A.I.; Dorado, M.; Guillén, M.T.; Robina, A.; Vivo, J.M.; Vázquez, C.; Ruiz, J. Development of meat and carcass quality characteristics in Iberian pigs reared outdoors. *Meat Sci.* **1999**, *52*, 315–324. [[CrossRef](#)]
32. Ruiz-Carrascal, J.; Ventanas, J.; Cava, R.; Andrés, A.I.; García, C. Texture and appearance of dry cured ham as affected by fat content and fatty acid composition. *Food Res. Int.* **2000**, *33*, 91–95. [[CrossRef](#)]
33. Fuentes, V.; Ventanas, J.; Morcuende, D.; Ventanas, S. Effect of intramuscular fat content and serving temperature on temporal sensory perception of sliced and vacuum packaged dry-cured ham. *Meat Sci.* **2013**, *93*, 621–629. [[CrossRef](#)]
34. Pérez-Alvarez, J.A.; Sayas-Barberá, M.E.; Fernández-López, J.; Aranda-Catalá, V. Physicochemical characteristics of Spanish-type dry-cured sausage. *Food Res. Int.* **1999**, *32*, 599–607. [[CrossRef](#)]
35. Bermúdez, R.; Franco, D.; Carballo, J.; Lorenzo, J.M. Influence of type of muscle on volatile compounds throughout the manufacture of Celta dry-cured ham. *Food Sci. Technol. Int.* **2015**, *21*, 581–592. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
36. Fulladosa, E.; Garriga, M.; Martín, B.; Guàrdia, M.D.; García-Regueiro, J.A.; Arnau, J. Volatile profile and microbiological characterization of hollow defect in dry-cured ham. *Meat Sci.* **2010**, *86*, 801–807. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
37. Ruiz, J.; Muriel, E.; Ventanas, J. The Flavour of Iberian Ham. In *Research Advances in the Quality of Meat and Meat Products*; F. Toldra, Ed.; Research Signpost: Trivandrum, India, 2002; pp. 289–309.
38. Toldrá, F.; Flores, M. The Role of Muscle Proteases and Lipases in Flavor Development During the Processing of Dry-Cured Ham. *Crit. Rev. Food Sci. Nutr.* **1998**, *38*, 331–352. [[CrossRef](#)]
39. Lorigo, L.; Estévez, M.; Ventanas, J.; Ventanas, S. Comparative study between Serrano and Iberian dry-cured hams in relation to the application of high hydrostatic pressure and temporal sensory perceptions. *Lwt Food Sci. Technol.* **2015**, *64*, 1234–1242. [[CrossRef](#)]

40. Ruiz-Ramírez, J.; Arnau, J.; Serra, X.; Gou, P. Effect of pH24, NaCl content and proteolysis index on the relationship between water content and texture parameters in biceps femoris and semimembranosus muscles in dry-cured ham. *Meat Sci.* **2006**, *72*, 185–194. [[CrossRef](#)]
41. Bermúdez, R.; Franco, D.; Carballo, J.; Sentandreu, M.Á.; Lorenzo, J.M. Influence of muscle type on the evolution of free amino acids and sarcoplasmic and myofibrillar proteins through the manufacturing process of Celta dry-cured ham. *Food Res. Int.* **2014**, *56*, 226–235. [[CrossRef](#)]
42. Ruiz-Ramírez, J.; Arnau, J.; Serra, X.; Gou, P. Relationship between water content, NaCl content, pH and texture parameters in dry-cured muscles. *Meat Sci.* **2005**, *70*, 579–587. [[CrossRef](#)]
43. Virgili, R.; Parolari, G.; Schivazappa, C.; Soresi Bordini, C.; Borri, M. Sensory and Texture Quality of Dry-Cured Ham as Affected by Endogenous Cathepsin B Activity and Muscle Composition. *J. Food Sci.* **1995**, *60*, 1183–1186. [[CrossRef](#)]
44. Jurado, Á.; García, C.; Timón, M.L.; Carrapiso, A.I. Effect of ripening time and rearing system on amino acid-related flavour compounds of Iberian ham. *Meat Sci.* **2007**, *75*, 585–594. [[CrossRef](#)]
45. García-Garrido, J.A.; Quiles-Zafra, R.; Tapiador, J.; Luque de Castro, M.D. Sensory and analytical properties of Spanish dry-cured ham of normal and defective texture. *Food Chem.* **1999**, *67*, 423–427. [[CrossRef](#)]
46. Chang, C.-L.; Liao, C.-S. Parameter Sensitivity Analysis of Artificial Neural Network for Predicting Water Turbidity. *Int. J. Geol. Environ. Eng.* **2012**, *6*, 657–660. [[CrossRef](#)]
47. Berry, M.J.A.; Linoff, G.S. *Data Mining Techniques: For Marketing, Sales, and Customer Relationship Management*; John Wiley & Sons: New York, NY, USA, 1997.
48. Boger, Z.; Guterman, H. Knowledge extraction from artificial neural network models. In Proceedings of the Computational Cybernetics and Simulation, IEEE Systems, Man and Cybernetics Conference, Orlando, FL, USA, 12–15 October 1997; Volume 4, pp. 3030–3035.



© 2020 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Artículo 2.

Comparison of artificial neural networks and multiple regression tools applied to near infrared spectroscopy for predicting sensory properties of products from quality labels

(Comparativa de Redes Neuronales Artificiales y herramientas de regresión múltiple aplicadas a la Espectroscopia del Infrarrojo Cercano para predecir propiedades sensoriales de productos acogidos a etiquetas de calidad)

Autores: Miriam Hernández-Jiménez, Pedro Hernández-Ramos, Iván Martínez-Martín, Ana M. Vivar-Quintana, Inmaculada González-Martin, Isabel Revilla

Revista: *Microchemical Journal* **159 (2020) 105459**. (Enviado: 25 de junio de 2020. Enviado después de revisión: 19 de agosto de 2020. Aceptado: 23 de agosto de 2020. Publicado: 27 de agosto de 2020). <https://doi.org/10.1016/j.microc.2020.105459>

Índices de calidad:

Cuartil: Q1 Área: Chemistry Analytical (2020).

Posición de la revista: 16/83

Número de citas:	1 en Google Scholar
(fecha de consulta 24/06/21)	1 en Web of Science

Artículo 2:

Resumen

Los productos acogidos a marcas de calidad, están obligados a acreditar y garantizar la autenticidad de sus atributos, protegiendo a los consumidores de situaciones fraudulentas y salvaguardando la reputación de la marca. Para ello deben someterse a un costoso y lento análisis sensorial que ha de ir precedido por la validación de un panel de cata. El reemplazo de la evaluación sensorial por otro análisis instrumental más rápido, simple y económico, como lo es la espectroscopía NIR, es un reto que ha demostrado ser efectivo en la predicción de parámetros sensoriales en otros alimentos como queso (González-Martín et al., 2011), fruta (Alhamdan et al., 2019) y productos cárnicos (Ortiz et al., 2006; Talens et al., 2013).

La espectroscopía NIR precisa la intervención de otros métodos de análisis e interpretación de los datos registrados. Los más utilizados son los métodos estadísticos multivariantes como la regresión por Mínimos Cuadrados Parciales Modificados. Este método es adecuado cuando las variables presentan dependencias lineales, lo que no siempre ocurre con los datos sensoriales. Por ello, las Redes Neuronales Artificiales son una herramienta alternativa por su capacidad computacional para procesar datos que no presentan relaciones lineales.

En el trabajo que se presenta, se analiza y compara la viabilidad de la predicción de parámetros sensoriales de chorizo, mediante el uso combinado de la tecnología de espectroscopía NIR y métodos quimiométricos como la regresión por MPLS y ANN. Ambos métodos utilizan la información de los espectros NIR, en el caso de MPLS es necesario pretratamientos espectrales, mientras que con ANN se utiliza la información espectral sin tratar. Por otra parte, se realizó una discriminación de las muestras según su pertenencia a la Indicación Geográfica Protegida (IGP) "Chorizo de Cantimpalos" y a la Marca de Garantía (MG) "Chorizo Zamorano", utilizando el método residual RMS-X (Raíz cuadrada de los promedios de los residuos al cuadrado).

Para ello se han tomado 72 muestras de chorizo 22 de las cuales pertenecen a la IGP "Chorizo de Cantimpalos", 36 a la MG "Chorizo Zamorano" y 14 de chorizo no acogido a marca de calidad, elaborados siguiendo sus respectivas normativas o de forma similar al haber sido adquiridas en la misma zona geográfica.

El análisis sensorial fue realizado por 10 panelistas previamente entrenados en el uso del Análisis Descriptivo Cualitativo (QDA), quienes evaluaron los 20 parámetros sensoriales estudiados y proporcionaron los valores hacia los que deberían converger los modelos estudiados.

Para el análisis de espectroscopía NIR se utilizó un equipo Foss NIR System 5000 al que se le acopló una sonda de fibra óptica de reflectancia remota, la cual se aplicó directamente a las rodajas de chorizo no sometidas a una preparación previa. Los registros se realizaron en la región NIR comprendida entre las longitudes de onda $\lambda=1100$ nm y $\lambda=2000$ nm con $\Delta\lambda=2$ nm de resolución espectral, lo que implica la obtención de 451 datos para cada muestra.

Para realizar el calibrado mediante MPLS, las muestras fueron divididas previa y aleatoriamente en dos conjuntos: calibración con 58 muestras y de validación externa con 14 muestras. Los espectros se procesaron, en primer lugar, mediante Análisis de Componentes Principales (PCA) encontrándose que eran necesarias entre 7 y 10 componentes para explicar el 98% de la variabilidad espectral según el atributo sensorial, eliminándose aquellas muestras que se consideraron fuera de la población por cumplir con el criterio de $H > 2.7$ (distancia de Mahalanobis).

Los efectos de dispersión se corrigieron empleando SNV, MSC, DT o SNV-DT aplicadas a cada espectro. Además, se probaron las correcciones espectrales mediante el cálculo de la 1ª y 2ª derivadas indicadas con la nomenclatura 2,4,4,1 (orden de la derivada, intervalo de cálculo de la derivada, intervalo para el primer suavizado, intervalo para el segundo suavizado). La validación interna se realizó mediante un proceso de validación cruzada con 6 subconjuntos y, mediante el criterio $T > 2.5$, eliminándose aquellas muestras en las que la diferencia entre los valores observado y esperado superaron este criterio. Se obtuvo el valor del Coeficiente de Correlación Múltiple ($RSQ > 0.5$), el valor del Error Estándar de Validación Cruzada (SECV) y comprobándose que los valores del Error Estándar de Predicción (SEP) y del Error Estándar de Predicción Corregido por las BIAS (SEPC) fuesen lo más parecidos posibles. El software utilizado fue Win ISI 1.50 (Infrasoft International, State College, PA).

Los modelos MPLS se optimizaron en base a los siguientes criterios: el que disponía de menores errores de calibración (SEC) y predicción (SEP) y con el valor de RSQ más alto.

De los 20 parámetros sensoriales evaluados por los catadores, con la calibración MPLS únicamente 10 presentaron valores de RSQ > 0.5 alcanzándose valores ligeramente superiores a 0.7 para los parámetros embarrado, sabor ácido y parámetros de textura. El número de parámetros calibrados y los valores de RSQ observados son superiores a los indicados en otros estudios.

En validación externa se aplicó la prueba t de Student para valores pareados sobre los valores predichos por el NIRS y los valores de referencia sensorial proporcionados por el panel de cata. No se encontraron diferencias significativas ($p > 0.05$) entre ambos conjuntos, lo que significa que los resultados de ambos métodos son comparables. Los valores de RMSE estuvieron entre 0.03 (olor interno anormal) y 0.40 (separación de la tripa y embarrado), por lo que se concluye que las ecuaciones de predicción fueron satisfactorias.

Cuando se realiza la calibración utilizando el método quimiométrico ANN y los espectros NIRS, se utiliza toda la información de los espectros, sin ningún tratamiento. En este caso, el conjunto de las muestras se dividió al azar en un conjunto de entrenamiento con 50 muestras (70%), un conjunto de validación con 11 muestras (15%) y un conjunto de prueba o test con 11 muestras (15%) para todas las ANN evaluadas. Se procesaron con una ANN feedforward del tipo MLP con una capa de entrada con 451 neuronas alimentadas con los valores obtenidos en la espectroscopía NIR, otra capa oculta con una configuración variable de entre 1 y 15 neuronas, y una capa de salida con una sola neurona para mostrar el valor de cada uno de los parámetros sensoriales. La función de transferencia implementada en las neuronas de la capa oculta fue la tangente hiperbólica sigmoidea, mientras que la lineal pura se utilizó para las neuronas de la capa de salida. El entrenamiento se realizó empleando el algoritmo de retropropagación del error de Levenberg-Marquardt. La matriz de pesos y BIAS se inicializó aleatoriamente utilizando un valor semilla conocido, permitiendo la reproducibilidad de los datos.

Para cada parámetro sensorial evaluado por los catadores, se realizaron 500 ensayos con estados de inicialización diferentes para cada configuración de neuronas en la capa oculta, lo que permitió determinar la mejor arquitectura de ANN. Se eligió la arquitectura con el valor RSQ más alto, menor RMSE y menor número de neuronas en la capa oculta. El software utilizado fue el Deep Learning Toolbox de MatLab R2018a (MathWorks®).

La predicción realizada por ANN alcanzó valores de RSQ > 0.7 para todos los parámetros salvo para los de intensidad de olor interno (0.61), calidad de olor

externo (0.67) y grasosidad (0.68). Los máximos valores fueron alcanzados por la dureza (0.92) y por mal olor interno, chiclosidad e intensidad de sabor (0.87).

El uso de las ANN ha permitido la predicción de los 20 parámetros sensoriales con valores de RSQ entre 0.61 y 0.92 frente a los 10 predichos por el método MPLS con RSQ entre 0.52 y 0.76.

Comparando los resultados de los métodos ANN vs MPLS, se confirma lo expresado en estudios previos, que señalan un mejor comportamiento de las ANN predictoras, frente al mostrado por los modelos de regresión múltiple MPLS en la predicción de parámetros sensoriales. Ello puede deberse a la no linealidad de los datos sensoriales y la mejor adaptación de las ANN para el tratamiento de este tipo de datos. Considerando únicamente los parámetros predichos por ambos métodos, se aprecia que los valores de SEP y SEP(C) son sensiblemente menores en las predicciones con ANN que en las obtenidos por MPLS, a excepción del parámetro separación de tripa. Sin embargo, el análisis de los valores de RMSE revela un mejor comportamiento general del MPLS con valores entre 0.03 y 0.40 para los 10 parámetros predichos, frente a los valores entre 0.25 y 0.73 obtenidos por la ANN para esos mismos parámetros. Este hecho podría indicar un número insuficiente de datos, respecto del necesario, para un buen entrenamiento de la ANN.

La optimización del modelo de discriminación, de acuerdo con el origen de las muestras, busca encontrar el modelo que proporcione mayor porcentaje de muestras clasificadas correctamente. Se utiliza el modelo RMS-X, mediante el programa WinISI, y los espectros NIRS optimizados con el tratamiento SNV (2,4,4,1). La discriminación según su origen muestra que la tasa de éxito general fue del 94,4% con una clasificación correcta del 90,9% de las muestras de IGP de Cantimpalos, del 100% de las muestras de MG Chorizo Zamorano y del 85,7% de las muestras no acogidas a ninguna marca de calidad.

material eliminado por intereses editoriales

Artículo 3.

Estimation of somatic cell count levels of hard cheeses using physicochemical composition and artificial neural networks

(Estimación del recuento de células somáticas en queso curado a partir de la composición fisicoquímica y redes neuronales artificiales)

Autores: P. A. Hernández-Ramos, A. M. Vivar-Quintana, and I. Revilla

Revista: *Journal of Dairy Science*. **102:1-11**. (American Dairy Science Association) (Enviado: 21 de marzo de 2018. Aceptado: 31 de octubre de 2018. Publicado online: 24 de diciembre de 2018). <https://doi.org/10.3168/jds.2018-14787>

Índices de calidad:

Cuartil: Q1 Área: Agriculture, Dairy and Animal Science (2019).

Posición de la revista: 5/63

Número de citas:	10 en Google Scholar
(fecha de consulta 24/06/21)	6 en Web of Science

Artículo 3:

Resumen

El queso es probablemente, junto con la mantequilla, el derivado lácteo más consumido en el mundo. Sus propiedades nutricionales y la enorme diversidad de productos comercializados, hacen de él un producto alimenticio muy extendido, apreciado y de gran importancia económica dentro del sector de la alimentación.

Las características de la leche, con la que se elabora el queso, influyen sobre su composición físico-química y, por tanto, en su calidad y propiedades organolépticas. Uno de los parámetros de calidad de la leche que influye en el precio que se paga por la misma, es el Recuento de Células Somáticas (RCS o SCC por sus siglas en inglés).

El SCC es una medida de los glóbulos blancos que hay en la leche. Su valor se utiliza como indicador del estado sanitario de un animal, o de todo un rebaño, dependiendo del momento de obtención de la muestra (Bergonier & Berthelot, 2003; Bergonier et al., 2003). Las células somáticas se encuentran en la leche con independencia del estado de salud del animal. Sin embargo, el nivel de SCC es lo que marca la diferencia entre los animales que pueden considerarse sanos y aquellos que pueden padecer enfermedades. Un incremento del SCC se debe, principalmente, a la respuesta inmunitaria del organismo ante la presencia de bacterias invasoras. Cuando estas bacterias se encuentran en la glándula mamaria (mamitis o mastitis), las células somáticas pueden transferirse de la sangre a la leche. A pesar de ello y para el caso de la leche de oveja, no se ha encontrado un criterio único que establezca el valor umbral de SCC que permita discernir entre animal sano y enfermo, debido a que es un parámetro que fluctúa por factores tan diversos como la edad, la etapa de lactancia o el método de cría.

Las directivas de la UE (European Commission, 2004), por ejemplo, no establecen valores umbrales y asumen valores de SCC de 2.000.000 células/ml como normales. Sin embargo, otros autores establecen que umbrales de SCC de 1.500.000 células/ml (Boyazoglu & Morand-Fehr, 2001) o de 1.000.000 células/ml (Gonzalo et al., 2000) son indicadores de estados de insalubridad de los rebaños.

Se ha constatado que valores altos de SCC en la leche de oveja tienen influencia sobre la composición química (Albenzio et al., 2004; Revilla et al., 2009a) y

repercuten en los procesos de elaboración del queso (Albenzio et al., 2004, 2011). Así, parámetros sensoriales como la textura y sabor, así como el grado de aceptación por parte del consumidor, pueden verse afectados por el SCC de la leche utilizada en su elaboración, por lo que resulta de interés predeterminar dicho parámetro para diferenciar las características atribuibles a la materia prima y las derivadas del proceso de elaboración. Para lograrlo, se plantea el uso de las Redes Neuronales Artificiales como método analítico del que se aprovecha su capacidad para emular el funcionamiento de las redes neuronales biológicas. Al igual que éstas últimas, una ANN es una red constituida por conexiones ponderadas que interconectan pequeñas unidades de procesamiento, también denominadas "neuronas", cuya respuesta depende no linealmente de las entradas que recibe. Su capacidad para el procesamiento paralelo, aprendizaje autónomo, tratamiento de información no lineal y almacenamiento del conocimiento adquirido, le permite establecer y procesar relaciones no lineales entre los datos que se posicionan a la entrada y salida de la propia red. Las ANN han sido empleadas, en el caso de las industrias queseras, para la autenticación y la clasificación (Cevoli et al., 2011, 2013), predicción de la maduración (Soto-Barajas et al., 2013), predicción del grado de humedad (Jiménez-Márquez et al., 2003, 2005) o para la optimización del proceso de elaboración (Horiuchi et al., 2004; Paquet et al., 2000).

En este estudio, se han tomado muestras de leche de oveja procedente de rebaños diferentes, categorizadas en 3 grupos en función de su SCC: menos de 500.000 células/mL (SCC bajo), entre 1.000.000 y 1.500.000 células/mL (SCC medio), y entre 2.500.000 y 3.000.000 células/mL (SCC alto). Todos los rebaños pertenecen a la misma zona geográfica (Zamora, España) habiendo estado sometidos a sistemas de crianza y regímenes de alimentación similares.

Los quesos se elaboraron siguiendo el protocolo establecido por la D.O. "Queso Zamorano". Para el análisis de los mismos, se tomaron 2 quesos por cada uno de los tiempos de maduración estudiados: 0-3-6-9 y 12 meses. Todos los análisis de composición se realizaron por triplicado determinándose los parámetros: pH, grasa total, acidez de la grasa, extracto seco, cenizas y proteínas, actividad del agua, color (CIE L^* , a^* , b^*) y la textura por medio de la fuerza de corte. Además, se analizó su composición en ácidos grasos totales identificándose 22 compuestos. De esta forma se obtuvieron 33 parámetros para cada una de las muestras.

Los resultados mostraron un efecto significativo del SCC sobre los parámetros analizados, existiendo una correlación directa con los valores de proteína, acidez de la grasa, humedad, fuerza de corte y pH; mientras que los valores de grasa, actividad

del agua y componente de color b^* mostraron una correlación inversa con el nivel de SCC. El análisis de resultados muestra también un efecto significativo del contenido de SCC únicamente para 8 de los 22 ácidos grasos analizados. Los valores más bajos de los ácidos láurico, mirístico, araquídico, miristoleico y palmitoleico se encontraron en los quesos procedentes de leche con SCC bajo que, a su vez, presentaban los valores más altos de los ácidos linolénico y los 2 isómeros de CLA.

Con respecto a la incidencia del tiempo de maduración sobre los parámetros de aspecto y composicionales, se ha observado una reducción de la actividad del agua, pH y la componente L^* de color. Por el contrario, se constató el incremento del extracto seco, la fuerza de corte, acidez de la grasa y componentes de color a^* y b^* con el tiempo. La maduración también afectó significativamente a los ácidos grasos saturados (SFA), tanto en los de cadena corta como larga, al observarse su incremento en el tercer mes de maduración.

La clasificación de los quesos, en función del SCC de la leche empleada para su elaboración, se ha realizado por medio de una ANN de tipo MLP entrenada con un algoritmo de retropropagación del error. La ANN disponía de tres capas: una capa de entrada con 33 neuronas (una por cada parámetro estudiado), una capa oculta con un número de neuronas variable entre 3 y 33 y una capa de salida con tres neuronas, que identificaba el nivel de SCC (SCC bajo, SCC medio y SCC alto). Las funciones de transferencia implementadas fueron la tangente sigmoide para las neuronas de la capa oculta y la lineal pura para las neuronas de la capa de salida. El conjunto de muestras original (80) se dividió en tres conjuntos: de entrenamiento con el 70% de las muestras, de validación con el 15% de las muestras y de test con el 15% de las muestras restantes.

El entrenamiento de la red se ha realizado utilizando la regla del descenso del gradiente inicializándose, de forma aleatoria, la matriz de pesos y sesgos a partir de un valor semilla permitiendo, de esta forma, la reproducibilidad de los datos (Pillonel et al., 2005).

Para la optimización de la ANN se ha variado el número de neuronas de la capa oculta, entre los valores correspondientes a los de las capas de entrada y salida. Por tanto, se han probado redes con un número entre 3 y 33 neuronas en la capa oculta, realizándose 1.000 ensayos para cada arquitectura.

Durante el proceso de aprendizaje, los errores de entrenamiento, validación y test disminuyeron paulatinamente según se incrementaba el número de interacciones. El entrenamiento se detuvo después de 49 epoch o pasadas, momento en el que se

inició el sobreajuste de la red. Éste se pone de manifiesto al seguir incrementándose el error generado por los datos del conjunto de validación, mientras que el generado por los datos del conjunto de entrenamiento continúa reduciéndose. El conjunto de test proporcionó una evaluación independiente de la capacidad de clasificación de la red.

La selección de la mejor arquitectura de red se realizó en base a tres criterios, que han permitido determinar la bonanza de la misma: las matrices de confusión (entrenamiento, validación, test y conjunta), el error cuadrático medio (MSE) y las curvas ROC que enfrentan las tasas de falsos positivos frente a las de positivos verdaderos. En este caso, la arquitectura de la mejor red encontrada disponía de 8 neuronas en la capa oculta, clasificando correctamente el 100% de las muestras y teniendo el menor MSE de todas las redes probadas.

Finalizado el proceso de entrenamiento y seleccionada la mejor red, ésta almacena tanto los valores de los pesos de cada una de sus conexiones, como el bias de cada neurona. Dichos valores pueden ser positivos o negativos para potenciar o inhibir la excitación de la neurona cuya entrada ponderan, pero es el valor absoluto lo que permite determinar la importancia que tiene cada conexión sobre la capacidad de clasificación de la red. En este estudio, se analizó el sumatorio de los cuadrados de los pesos de las conexiones existentes entre las neuronas de la capa de entrada y oculta. Se ha podido determinar que las entradas correspondientes a los ácidos linoleico (C18:2) y linolénico (C18:3), a los isómeros de CLA y la acidez de la grasa, son las que más contribuyen al correcto funcionamiento de nuestra red.



Estimation of somatic cell count levels of hard cheeses using physicochemical composition and artificial neural networks

P. A. Hernández-Ramos,¹ A. M. Vivar-Quintana,^{2*} and I. Revilla²

¹Area de Expresión Gráfica en la Ingeniería, University of Salamanca, Escuela Politécnica Superior de Zamora, Avenida Requejo 33, 49022 Zamora, Spain

²Food Technology Area, University of Salamanca, Escuela Politécnica Superior de Zamora, Avenida Requejo 33, 49022 Zamora, Spain

ABSTRACT

This study addresses the prediction of the somatic cell counts of the milk used in the production of sheep cheese using artificial neural networks. To achieve this objective, the neural network was designed using 33 parameters of the physicochemical composition of the cheeses obtained after they have been matured for 12 mo as input data. The physicochemical analysis of the cheeses revealed that the somatic cell count level of the cheese has a significant influence on the amount of protein, fat, dry extract, and fatty acids. When properly set up, the neural network allows the correct classification of the cheeses (100% of correct results in both training and test phases) and therefore their samples in each of the 3 nominal output variables (low, average, and high somatic cell counts). The fatty composition of the cheeses, individual fatty acids, and fat acidity are the variables that most affect the correct operation of the neural network.

Key words: somatic cell count, artificial neural network, cheese, classification

INTRODUCTION

The somatic cells found in milk from healthy animals are mainly macrophages and epithelial cells (Concha et al., 1986; Leitner et al., 2000). When an infection of the mammary gland occurs, an increase in SCC, mainly of polymorphonuclear neutrophils that may liberate proteolytic enzymes (Le Roux et al., 2003), can be observed (Poutrel, 1981). As a result SCC levels are often used as indicators of animal mammary disease. However, as has previously been pointed out by several authors, it is very hard to establish the SCC level indicative

of an inflammation of the mammary gland because it fluctuates considerably in ewe milk, and other factors such as age, animal husbandry practices, climate, and lactation stage may affect the SCC, with very high levels being reached during the colostrum period and at the end of lactation (Dulin et al., 1983; Menzies and Ramanoo, 2001). Although EU Directives (EC, 2004) did not establish threshold values for the SCC in ewe milk, it has been suggested that a SCC value equal to 2,000,000 can be considered normal. Nevertheless, Boyazoglu and Morand-Fehr (2001) suggested a threshold level for subclinical mastitis in sheep close to 1,500,000 cells/mL, whereas Gonzalo et al. (2000) proposed that ovine flocks with SCC >1,000,000 should indicate an unsatisfactory sanitary category.

The increase in the SCC of ewe milk leads to a decrease in the fat content, TS, caseins, and lactose amount and to an increase in whey proteins other than α -LA and β -LG, pH, and fat acidity (Pirisi et al., 1996, 2000; Leitner et al., 2003; Albenzio et al., 2004; Revilla et al., 2007, 2009a,b; Rodríguez-Nogales et al., 2007). Moreover, the cheese-making properties of ewe milk with a high SCC are characterized by longer coagulation time, poorer syneresis, a lower cheese yield, higher protein and fat losses in the whey, and an increased curd moisture content (Pirisi et al., 1996; Jaeggi et al., 2003; Albenzio et al., 2004, 2011; Revilla et al., 2007). These poor cheese-making properties are due to an increase in proteolytic activity (Revilla et al., 2007, 2011; Albenzio et al., 2011; Pinto et al., 2013) due to the positive correlation between intact caseins and curdling properties (Revilla et al., 2009b). The higher proteolytic activity and also lipolytic activity (Lurueña-Martínez et al., 2010a) affects the texture, flavor, and acceptability of hard ewe cheeses produced from milk with a high SCC. They have lower instrumental hardness and are described as softer, less creamy, more granulose, and also more rancid and pungent, and these cheeses were less popular with consumers (O'Farrell et al., 2002; Jaeggi et al., 2003; Revilla et al., 2007, 2009a; Lurueña-Martínez et al., 2010a). The undesirable ef-

Received March 21, 2018.

Accepted October 31, 2018.

*Corresponding author: avivar@usal.es

fects observed justify the use of the SCC to set milk prices (Kalantzopoulos et al., 2004).

Nonetheless, proteolytic and lipolytic activities are inherent to the cheese maturation process, and after several months it may be difficult to distinguish the SCC and the effects of time. In fact there were no significant differences in the percentage of proteolysis or chemical composition up until the sixth month of maturation, although higher fat acidity and higher pH was observed in high SCC milk cheeses (Jaeggi et al., 2003; Revilla et al., 2007, 2011) and some textural and flavor defects were reported after 12 mo of ripening (Lurueña-Martínez et al., 2010b). Despite the relevance of the SCC on cheese quality, no data regarding cheese classification according to this factor have been found.

Despite this, interest is growing in determining the quality and authenticity of dairy products; it is often not possible to make a definitive statement on cheese quality using only a physicochemical analysis due to the complexity of the matrix and the cheese-making process. The coupling of analytical and chemometric tools has proved to be very useful in product authenticity and authentication (Karoui and De Baerdemaeker, 2007). Among chemometric tools, the artificial neural network (ANN) is well suited for food quality prediction because it can handle complex nonlinear relationships with ease, even when the exact nature of such behavior is unclear. For this reason ANN are being widely used in several disciplines for modeling complex real-world problems (Basheer and Hajmeer, 2000).

Artificial neural networks have been used successfully in the dairy industry to predict shelf life (as reviewed by Goyal and Goyal, 2012), physicochemical composition (Etzion et al., 2004; Khanmohammadi et al., 2009), and sensory characteristics (Singh et al., 2009; Cruz et al., 2011); to discriminate varieties, geographical origin, or seasonal variations (He et al., 2005; Cruz et al., 2009, 2013; Gori et al., 2012); to control milk quality (Hettinga et al., 2008; Souza et al., 2011); and to model operational parameters during product manufacture (Funahashi and Horiuchi, 2008). As far as cheese manufacture is concerned, ANN have been applied mainly for authentication, classification, or traceability purposes (Pillonel et al., 2005; Zeppa et al., 2005; Barile et al., 2006; Verdini et al., 2007; Cevoli et al., 2011, 2013) but also for predicting ripening (Soto-Barajas et al., 2013) or moisture (Jimenez-Marquez et al., 2003, 2005) or the optimization of the cheese-making process (Paquet et al., 2000; Horiuchi et al., 2004).

In this study we developed an ANN model to predict the SCC levels of the raw ewe milk used for hard cheese manufacture. The physicochemical composition, color,

texture, and individual fatty acids analyzed at different stages of cheese ripening (up to 12 mo) were selected as input variables. The ANN model was also used to identify the most important factors of the predicted variable and to study its relationships with the dependent variable.

MATERIALS AND METHODS

Milk Collection

Different milk samples were taken from bulk milk of herds with 3 SCC: less than 500,000 cells/mL (low SCC), between 1,000,000 and 1,500,000 cells/mL (average SCC), and between 2,500,000 and 3,000,000 cells/mL (high SCC). The upper and lower limits were set according to the highest and lowest SCC values found in the region throughout the year. The herds (3 herds for each SCC level) were selected on the basis of the milk SCC recorded during the previous months, choosing herds with a SCC that was always within the limits of each group.

All herds were reared in Zamora (Spain) under identical husbandry systems and feeding regimens. Samples were taken from bulk milk from the first week of November until the first week of December for 2 consecutive years. During this period the ewes were in the mid-lactation stage; the animals were kept in stables, fed with concentrates composed of beetroot pulp, alfalfa, barley, corn, soy, and cotton, and were machine-milked. On the sampling day, an aliquot was submitted for Fossomatic SCC analyses and total bacteria counts at the certified laboratory of the Regional Government of Castilla y León, Spain. The results showed that the samples were within the range initially selected for SCC. Regarding bacterial counts, the group of sheep milk with low SCC values showed low bacterial levels, whereas no significant differences were observed between the groups of sheep milk with average and high SCC values.

Cheese-Making Procedure

Nonstandardized raw milk (40 L) was incubated with 36 mg/L of direct-vat-set starters consisting of *Streptococcus lactis*, *Streptococcus cremoris*, and *Streptococcus diacetylactis* (MA400, Choozit, Danisco, Sassenage, France) at 30°C. After 30 min at 32°C, when the pH was 6.5 to 6.6, 11.25 mg/L of calf rennet (90% chymosin, 10% pepsin, 1:150,000 strength) was added to each vat. Coagulation was allowed to take place over 40 to 70 min. When the coagulum had developed the desired firmness, evaluated subjectively, the curds were

cut with a cheese harp until pieces similar in size to a grain of rice had been obtained. Subsequently the curd was stirred for 30 min and heated for 20 min at 36°C until it had reached the desired consistency to improve its drainage with sieves. The curd was packed in round hoops (1 kg) and pressed for 5 h at 1.5 kg·cm⁻² at 20°C. After pressing the cheeses were salted by soaking them in sodium chloride brine (16° Baumé) at 18°C for 12 h. The cheeses were then moved to a drying chamber where temperature was 15°C and relative humidity was 78% during the first month, 70% during the second and third months, and 66% until ripening was completed. For each manufacturing process 2 cheeses were removed from each vat for analysis after the cheese-making process (0 mo) and after 3, 6, 9, and 12 mo of ripening.

Physicochemical Analysis

All compositional analyses were carried out in triplicate. Cheese samples were analyzed for pH (potentiometric method, CRISON Basic20), fat (Van Gulik method; ISO, 1975), dry extract (IDF, 1982), ashes (AOAC International, 2000), and fat acidity (IDF, 1969). The total amount of nitrogen (AOAC International, 1995) was determined by using the Kjeldahl method and the results were expressed as protein equivalents (total N × 6.38) on the basis of dry extract. Water activity was determined (a_w) in grated cheese with a_w Sprint equipment (Novasina, Axair Ltd., Pföfikan, Switzerland).

Color was measured on a 1-cm-thick slice from the central diameter of each cheese wheel by using a MiniScan XEPlus (Hunter Lab, Reston, VA) with a 25-mm measuring head and diffuse/8° optical geometry. The CIELab parameters were calculated for the CIE illuminant D₆₅ and 10° standard observer conditions. The parameters calculated were lightness (L*), redness (a*), and yellowness (b*; CIE, 1975). The color was determined on the surface of a cheese slice (1 cm thick) obtained by cutting the cheese into 2 halves. Determinations were carried out in triplicate in the center and on the edges of the slice.

Samples for cheese textural analysis had been kept at 24°C for 1 h before the analysis and were obtained by cutting the 1-cm-thick slice from the central diameter into 6 rectangular parallelepipeds, 1 × 1 cm thick and 3 cm long. A TX-T2iplus equipped with a Warner-Bratzler probe (Stable Micro Systems, Surrey, UK) was used to determine the instrumental texture. The crosshead speed was 1 mm/s, and the maximum peak force (Warner-Bratzler shear force) necessary to cut each parallelepiped transversally and completely was recorded.

Fatty Acid Analysis

The fatty acids were determined by following the method described by Lurueña-Martínez et al. (2010a). Lipids were extracted using the International Standard Method described in ISO 14156:2001 (ISO, 2001). Fatty acids of all samples were methylated and analyzed by GC (GC 6890 N, Agilent Technologies, Santa Clara, CA) using a 100 m × 0.25 mm × 0.20 μm capillary column (SP-2560, Supelco Inc., Bellefonte, PA). The oven temperature program was 150°C, increasing temperature at 1°C/min to reach 165°C, then increasing at 0.20°C/min to reach 167°C and then increasing by 1.50°C/min to reach 225°C, where it was maintained for 15 min. One microliter was injected into the chromatograph, equipped with a split/splitless injector and an flame ionization detector. The injector and detector temperatures were 250°C. The carrier gas was helium at 1 mL/min and split (20:1). The different fatty acids were identified by the retention time compared with the corresponding standards including the 4 CLA isomers CLA *cis*-9,*trans*-11, CLA *trans*-10,*cis*-12, CLA *cis*-9,*cis*-11, and CLA *trans*-9,*trans*-11 (Larodan Fine Chemicals AB, Malmo, Sweden). Fatty acid contents were calculated using chromatogram peak areas and were expressed as grams per 100 g of total of fatty acid methyl esters.

Artificial Neural Network

Artificial neural network models were performed using Matlab 8.1 (R2017a, MathWorks Inc., Natick, MA). A multi-layered feed-forward network with back-propagation was built to predict the specific classes to which the samples belong. The tangent sigmoid and pure linear transfer functions were used in the hidden and output layers, respectively. The weight and bias matrix was randomly initialized but by using the same seed value that allows the reproducibility of data (Pillonel et al., 2005). The error minimization process was achieved by using the gradient descent method. General architecture of this ANN includes an input, an output, and 1 hidden layer. The input layer had 33 neurons corresponding to the different parameters quantified in the samples summarized in Table 1. Three nominal output variables (low SCC, average SCC, and high SCC) were used to perform classification tasks: the target output is 1.0 in the correct class output and 0.0 in the others (Cevoli et al., 2011; Gori et al., 2012). Networks with one hidden layer but with different number of neurons were tested to select the most accurate classification results.

The original data set (80 observations) was divided at random into a training set (70%, 56 observations), a verification set (15%, 12 observations), and a test set (15%, 12 observations) for all ANN tested. The verification set was used to identify the best network and to indicate possible overlearning, and the test set was treated as an unknown so as to provide an independent assessment of the classifying capability of the network.

The best network structure selection was performed using several criteria: the confusion matrices (training, verification, and test sets) that account for the samples that were correctly classified, the mean square error (MSE), and the plot of receiver operating characteristics that correlates the false positive rate with the true positive rate.

RESULTS AND DISCUSSION

Analytical Results

Table 1 shows the yearly average values obtained from the physicochemical analysis of low SCC (less than 500,000 cells/mL), average SCC (between 1,000,000 and 1,500,000 cells/mL), and high SCC (between 2,500,000 and 3,000,000 cells/mL) milk cheeses and the statistical significance of the 3 factors considered: the SCC level, the month of ripening, and the year of sampling.

Results show a significant effect of the SCC on protein content that underwent a statistically significant increase as the SCC values increased. This result differs from those previously reported by other authors who

Table 1. Mean values of the parameters analyzed of hard ewe milk cheeses in different SCC groups

Item	SCC ($\times 1,000/\text{mL}$)			Significance		
	<500	1,000–1,500	2,500–3,000	SCC	Month	Year
pH	5.33	5.35	5.37	NS	***	NS
Fat ¹ (%)	54.04 ^b	53.35 ^{ab}	52.60 ^a	*	NS	***
Protein ² (%)	38.90 ^a	39.70 ^{ab}	40.07 ^b	*	NS	***
Ash ³ (%)	6.84	6.87	7.10	NS	NS	***
Dry extract (%)	77.79 ^b	76.64 ^a	77.02 ^{ab}	*	***	NS
Water activity	0.853 ^{ab}	0.858 ^b	0.845 ^a	*	***	**
Fat acidity ⁴	3.76 ^a	5.44 ^b	8.79 ^c	***	***	***
L* ⁵	78.45	78.94	79.94	NS	***	***
a* ⁵	-0.538	-0.069	0.294	NS	***	NS
b* ⁵	20.09 ^b	18.88 ^a	18.95 ^a	*	***	NS
WBSF ⁶ (N)	29.94 ^b	25.33 ^a	25.56 ^a	*	***	***
Fatty acid						
Butyric (C4:0)	1.45	1.38	1.39	NS	***	NS
Caproic (C6:0)	2.12	2.11	2.11	NS	***	NS
Caprylic (C8:0)	2.59	2.66	2.68	NS	***	NS
Capric (C10:0)	8.24	8.79	9.22	NS	***	NS
Lauric (C12:0)	4.68 ^a	5.01 ^{ab}	5.34 ^b	*	***	NS
Myristic (C14:0)	10.42 ^a	11.17 ^b	11.76 ^b	***	*	**
Myristoleic (C14:1)	0.17 ^a	0.22 ^b	0.23 ^b	**	*	**
Palmitic (C16:0)	25.23	25.04	24.86	NS	***	NS
Palmitoleic (C16:1)	1.13 ^a	1.22 ^b	1.25 ^b	**	NS	NS
Heptadecanoic (C17:0)	0.62	0.65	0.63	NS	***	***
Heptadecenoic (C17:1)	0.18	0.20	0.19	NS	NS	NS
Stearic (C18:0)	12.04	11.44	11.19	NS	***	NS
Elaidic (C18:1 <i>trans</i>)	2.01	1.69	1.43	NS	NS	NS
Oleic (C18:1)	18.20	18.23	18.03	NS	***	NS
Linoleic (C18:2)	2.74	2.46	2.23	NS	NS	NS
Araquidic (C20:0)	0.05 ^a	0.05 ^a	0.06 ^b	*	NS	NS
Linolenic (C18:3)	0.50 ^{ab}	0.52 ^b	0.43 ^a	*	NS	NS
Eicosapentaenoic acid (C20:5)	0.04	0.04	0.04	NS	NS	NS
Docosahexaenoic acid (C22:6)	0.02	0.02	0.02	NS	NS	NS
CLA (<i>cis</i> -9, <i>trans</i> -11)	0.53 ^b	0.45 ^a	0.41 ^a	**	NS	**
CLA (<i>cis</i> -9, <i>cis</i> -11)	0.07 ^b	0.07 ^{ab}	0.06 ^a	*	NS	*
CLA (<i>trans</i> -9, <i>trans</i> -11)	0.04	0.04	0.04	NS	NS	***

^{a-c}Values followed by different letter in the same row differ significantly according to the Tukey test ($P < 0.05$).

¹Fat content on a dry weight basis.

²Total % N $\times 6.38$, on a dry weight basis.

³Ash on a dry weight basis.

⁴mg of KOH per gram of fat.

⁵L* = lightness; a* = redness; b* = yellowness.

⁶WBSF = Warner-Bratzler shear force.

* $P \leq 0.05$; ** $P \leq 0.01$; *** $P \leq 0.001$.

either failed to find significant differences among SCC levels both in freshly elaborated and ripened cheese (Pirisi et al., 2000; Jaeggi et al., 2003; Nudda et al., 2003; Revilla et al., 2011, 2009b) or found significantly lower values of casein content, both α -CN and β -CN, as the SCC increased (Revilla et al., 2011, 2007), which is attributable to the higher proteolytic activity as the SCC increased (Albenzio et al., 2004, 2011).

The fat content was significantly lower in cheeses with higher SCC levels, due to the lower initial milk fat content of high SCC milk (low SCC = 8.65%; average SCC = 8.49%, high SCC = 7.52%) and to a higher lipolytic activity as previously observed for high SCC cow milk (Gargouri et al., 2008). The higher lipolytic activity of high SCC cheeses is due to the lipase activity of somatic cells that produces higher concentrations of free fatty acids (Albenzio et al., 2011), increasing fat acidity. Thus, it may be seen that fat acidity was significantly higher in the cheeses with a high SCC, with the differences being wider as ripening progressed.

The dry extract was significantly affected by SCC levels and low SCC cheeses have higher values of this parameter, which is in agreement with previous research that reported higher moisture values for cheeses made from milk with high SCC levels (Jaeggi et al., 2003; Albenzio et al., 2004; Revilla et al., 2009b). This result may be due to an alteration in the milk protein composition and mineral balance (Munro et al., 1984), but the somatic cells themselves may also contribute to the higher cheese moisture content (Marino et al., 2005). High moisture levels are known to accelerate proteolysis [and the increase of moisture with the SCC may have promoted higher proteolysis in the cheese (Jaeggi et al., 2003)]. However, water activity was significantly lower in high SCC cheeses, because the higher the proteolysis and lipolysis the higher the release of AA, peptides, organic acids, and calcium phosphate, which are the compounds that reduce water activity.

Low SCC cheeses had significantly higher values of b^* as they were more yellow than average SCC and high SCC cheeses, but we observed no significant differences for L^* and a^* . The results of Rohm and Jaros (1997) indicated that the yellowness index increased with the unsaturation of fat and DM content, mainly with the amount of fat (Sánchez-Macías et al., 2010), and results showed that low SCC cheeses showed significantly lower levels of SFA (low SCC = 67.44, average SCC = 68.30, high SCC = 69.24) and higher levels of dry extract and fat content as shown in Table 1.

Cheese texture determined as Warner-Bratzler shear force showed a significant decrease when there was an increase from low to average SCC levels. Textural problems in ewe cheeses as the SCC increases have been

previously observed both in recently manufactured (Pirisi et al., 2000) and in matured cheese (Jaeggi et al., 2003; Revilla et al., 2009a). These problems are related to the higher moisture that reduces the coherence of the protein matrix (Fox et al., 2000), but mainly to the higher proteolysis in high SCC cheeses that reduces the strength of the gel and decreases the shear force (Revilla et al., 2009a). Previous studies revealed higher amounts of fragment I of α_{S1} -casein in high SCC cheeses, which is associated with cheese texture problems such as increased crumbliness (Irigoyen et al., 2000; Sousa et al., 2001; Revilla et al., 2007).

Finally, the SCC showed no significant effect on ash content and pH tended to show higher values as the SCC increased, which agreed with previous studies (Revilla et al., 2007, 2009b), but in this case the differences were not statistically significant.

Fatty acid composition showed a significant effect on the SCC in 8 out of 23 individual fatty acids quantified. Among these, SFA (lauric, myristic, and araquidic acids) and MUFA (myristoleic and palmitoleic) had significantly lower values in low SCC cheeses, whereas PUFA levels (linolenic and 2 CLA isomers) were significantly higher, which was in contrast to previous studies that failed to find any differences in the fatty acid profile due to the SCC (Laurinaviciute et al., 2004).

The month of ripening significantly affected dry extract and water activity due to the progressive loss of water during maturation. This process was also mainly responsible for the increase in Warner-Bratzler shear force. Fat acidity increased because as cheese ages the total free fatty acid content also increases (Pavia et al., 2000), which also affects the pH values. As far as cheese color is concerned, L^* was significantly lower while a^* and b^* were significantly higher as ripening progressed due to the proteolytic and lipolytic process and to the increase in DM (Rohm and Jaros, 1997). Finally, ripening significantly affected SFA because a significant increase in short-chain SFA together with an increase in long-chain SFA was observed in both years in the third month of maturation.

The year of manufacture significantly affected fat, protein, ash, and water activity and this may also account for the observed differences in color and texture. Finally, lipolysis was more intense in the first year with higher mean values of fat acidity (7.16 vs. 6.67) being attained.

ANN Modeling

The best network structure selection was performed using several criteria: the confusion matrix (training, verification, and test sets) that accounts for the sam-

Table 2. Results of artificial neural network with 33 input units and 3 nominal output variables (low, average, and high SCC): the mean square error (MSE) and correctly classified cases (%)

No. of neurons in the hidden layer	MSE	Correct classification cases (%)			
		Training	Validation	Test	Total
3	0.295	55.3	41.6	50.0	52.5
4	0.336	44.6	41.6	33.3	42.5
5	0.304	51.7	58.3	33.3	50.0
6	0.288	58.9	50.0	83.3	61.2
7	0.354	42.8	33.3	16.6	37.5
8	0.171	100.0	100.0	100.0	100.0
9	0.337	44.6	58.3	25.0	43.7
10	0.217	91.0	83.3	83.3	88.7
11	0.286	64.2	58.3	41.6	60.0
12	0.326	46.4	50.0	50.0	47.5
13	0.224	89.2	75.0	66.6	83.7
14	0.264	71.4	75.0	50.0	68.7
15	0.224	91.0	66.6	58.3	82.5
16	0.228	83.9	91.6	83.3	85.0
17	0.215	87.5	83.3	58.3	82.5
18	0.235	87.5	66.6	50.0	78.7
19	0.299	57.1	66.6	50.0	57.5
20	0.324	53.5	50.0	33.3	50.0
21	0.322	48.2	50.0	50.0	48.7
22	0.316	58.9	33.3	25.0	50.0
23	0.239	82.1	66.6	66.6	77.5
24	0.348	19.6	66.6	25.0	27.5
25	0.361	37.5	50.0	50.0	41.2
26	0.256	78.5	50.0	75.0	73.7
27	0.346	46.4	50.0	25.0	43.7
28	0.199	100.0	75.0	66.6	91.2
29	0.302	67.8	33.3	33.3	57.5
30	0.356	33.9	58.3	25.0	36.2
31	0.274	73.2	50.0	50.0	66.2
32	0.363	32.1	50.0	41.6	36.2
33	0.200	96.4	75.0	75.0	90.0

ples that were correctly classified, the MSE, and the plot of receiver operating characteristics that correlates the false positive rate with the true positive rate. As it is recommended that the number of neurons in the hidden layer should be between the input and the output layer size and determined empirically (Berry and Linoff, 1997; Borguer and Guterman, 1997), networks with one hidden layer but with several neurons ranging from 3 to 33 were tested to select that with the best classification ability. The results of the MSE and the training, validation, and testing to the neural networks are summarized in Table 2. A total of 60,000 RNA have been trained. For each configuration (from 3 to 33 neurons in the hidden layer), 1,000 RNA were trained.

The best ANN configuration for classifying cheeses correctly in accordance with the SCC of the milk used in their production is that presenting 8 neurons in the hidden layer. This ANN configuration gave the best results for each of the selection criteria used, classifying 100% of the samples correctly and having the lowest MSE of all the networks tested.

According to Demuth and Beale (1994), when the verification error increases for a certain number of interactions, the training must be stopped. The training and validation errors were monitored during the process (Figure 1). Training, validation, and test median errors decreased continuously with the number of interactions; the training was stopped after 49 epochs before the network began to overfit the data and the errors on the verification set began to increase.

Identification of Important Input Variables

The effect of each input variable on the modeled variables was evaluated by analyzing the weights of each of the inputs of the neurons of the hidden layer. The neurons of a neural network are activated or inhibited in accordance with the inputs they receive and the “importance” of these inputs regarding the problem to be solved. This importance is represented as a “weight” for each input in the form of numerical values that multiply the values of each input. The final state of excitation is determined by comparing the inputs, weighted by their respective values, with a threshold value or “bias.” The final result of the training process of a neural network is the determination of the values that the bias and weights must have to solve the problem for which the network has been trained.

In our case the neural network is programmed with a ToolBox of the Matlab program (of MathWorks). Once the training stage has been completed, these values

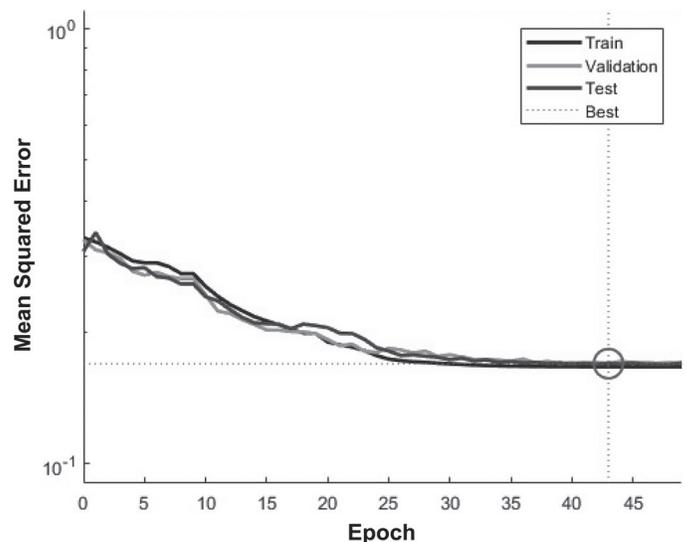


Figure 1. Plot of the mean square error relative history with 33 input units and 8 neurons in the hidden layer. Best validation performance is 0.16951 at epoch 43.

Table 3. Weights of each of the inputs in each of the 8 neurons of the hidden layer obtained by means of ToolBox from the Matlab (MathWorks, Natick, MA) program

Input ¹	Neurons in the hidden layer							
	1	2	3	4	5	6	7	8
Butyric (C4:0)	-0.055	-0.309	-0.788	0.337	0.156	0.908	-0.188	-0.358
Caproic (C6:0)	0.530	0.224	-0.392	-0.247	-0.180	0.570	0.471	0.032
Caprylic (C8:0)	0.129	0.159	-0.077	0.020	-0.339	0.299	0.087	0.649
Capric (C10:0)	-0.568	0.035	0.032	-0.044	-0.108	-0.073	-0.130	0.373
Lauric (C12:0)	-0.011	-0.157	0.264	0.347	0.129	-0.211	0.162	-0.116
Myristic (C14:0)	0.065	0.151	0.577	0.644	0.735	-0.018	-0.526	0.265
Myristoleic (C14:1)	0.474	0.524	1.017	-0.200	0.867	-0.105	-0.567	0.985
Palmitic (C16:0)	0.373	-0.934	-0.300	0.426	0.708	-0.318	-0.327	-0.388
Palmitoleic (C16:1)	0.877	0.699	0.278	0.295	0.341	-0.073	-0.586	1.258
Heptadecanoic (C17:0)	-0.439	0.224	0.474	0.430	1.053	0.801	-0.270	-0.064
Heptadecenoic (C17:1)	0.212	1.744	0.113	0.198	0.590	0.928	-0.403	0.757
Stearic (C18:0)	-0.026	0.813	-0.462	0.060	-0.301	0.478	-0.095	-0.170
Elaidic (C18:1 <i>trans</i>)	0.050	-1.589	-0.964	-0.182	-1.466	0.914	0.138	-0.655
Oleic (C18:1)	-0.572	1.566	0.271	-0.311	-0.310	0.553	-0.238	0.260
Linoleic (C18:2)	1.798	-1.939	-1.188	-0.167	-0.920	-1.643	1.131	-0.182
Araquidic (C20:0)	-0.735	1.372	0.332	0.383	0.412	1.715	-0.043	-0.504
Linolenic (C18:3)	1.642	-1.654	-0.171	0.132	-1.619	-1.088	0.327	2.559
EPA (C20:5)	-0.859	-0.604	1.093	0.435	0.460	0.653	0.062	0.093
DHA (C22:6)	0.330	-0.787	-0.063	-0.118	0.306	-0.808	-0.413	1.133
CLA (<i>cis</i> -9, <i>trans</i> -11)	-0.068	-0.949	-0.606	-0.017	-1.404	0.279	0.576	-2.214
CLA (<i>cis</i> -9, <i>cis</i> -11)	0.872	-0.982	-0.994	0.338	-0.989	-0.900	0.147	2.230
CLA (<i>trans</i> -9, <i>trans</i> -11)	-1.098	-1.927	0.467	0.607	-0.141	1.079	0.331	-0.284
pH	-0.008	-0.728	0.610	0.164	0.149	0.618	-0.011	0.259
Fat (%)	0.176	0.614	-0.466	-0.589	0.015	0.103	-0.090	-0.586
Protein (%)	0.006	0.686	-0.067	0.552	-0.484	0.301	-0.032	0.359
Ash (%)	-0.034	-0.414	-0.584	-0.696	0.046	-0.378	0.536	-0.799
Dry extract (%)	0.267	-0.382	-0.261	0.341	0.202	-0.193	0.441	0.109
Water activity	0.319	-0.071	-0.466	0.879	-0.200	0.655	-0.048	0.437
Fat acidity (mg of KOH per g of fat)	-1.585	0.402	1.166	0.190	1.037	1.241	-1.021	-1.000
L*	-0.449	0.314	-0.311	-0.170	-0.169	0.286	0.094	-0.905
a*	-0.028	0.379	-0.089	-0.310	0.017	-1.053	-0.211	0.366
b*	0.447	-0.365	-0.207	0.068	-0.249	-0.878	0.449	0.357
WBSF (N)	0.599	0.258	0.153	0.188	-0.039	-0.391	0.166	1.033

¹EPA = eicosapentaenoic acid; DHA = docosahexaenoic acid; L* = lightness; a* = redness; b* = yellowness; WBSF = Warner-Bratzler shear force.

can be stored on a multidimensional array that can be transformed into 3 arrays by means of the “separateweb” function of the ToolBox itself. In this way we can obtain data on the weight of each of the inputs of the neurons of the hidden layer (Table 3).

In view of these results, we can observe how in the network training process different weights (positive or negative) have been allocated to each of the inputs of each of the neurons of the hidden layer. The absolute weight of each input on the neuron gives us an idea of the importance of this input on the correct classification capacity of said neuron. To analyze the results obtained in a simple manner, it was decided to calculate the quadratic weight of each of the inputs, which can be understood as the sum of the squared weight of each of the 8 neurons of the hidden layer, allocated by the neural network for that parameter. The data obtained are shown in Figure 2. The fatty composition of the cheese has a considerable influence when predicting correctly the SCC of the milk used to produce it. The variables

that most contribute to the correct operation of our network are linoleic (C18:2) and linolenic (C18:3) acid followed by CLA isomers and fat acidity.

The levels of linoleic acid, linolenic acid, and CLA isomers were higher in cheeses produced with low SCC (Table 1), and similar results were found by Coelho et al. (2017) in cow milk cream with a low SCC. Milk with different SCC presents different profiles of endogenous enzymes entailing different degrees of lipolysis, which give rise to dairy products with different characteristics (Li et al., 2014). These longer-chain fatty acids are derived from blood lipids produced during the digestion and absorption of dietary fat or from the mobilization of fatty acids from adipose tissue (Zeppa et al., 2003). These fatty acids might be further modified in the mammary gland through the activity of desaturase enzymes (Vlaeminck et al., 2006). It has been suggested that the lower concentrations of these compounds in milk with high SCC may be related to reduced food intake by the sheep (Carboni et al., 2017), as was already observed

in cows affected by clinical mastitis (Sepúlveda-Varas et al., 2014).

Another important parameter of the network is fat acidity. As we have already seen in Table 1, as the SCC increased, higher fat acidity values were also observed.

The SCC is an important source of endogenous proteins including enzymes; a wide range of enzymes are released into milk after the lysis of SCC (e.g., lipoprotein lipase; Li et al., 2014). Lipoprotein lipase activities were detected in high SCC milk (Azzara and Dimick, 1985);

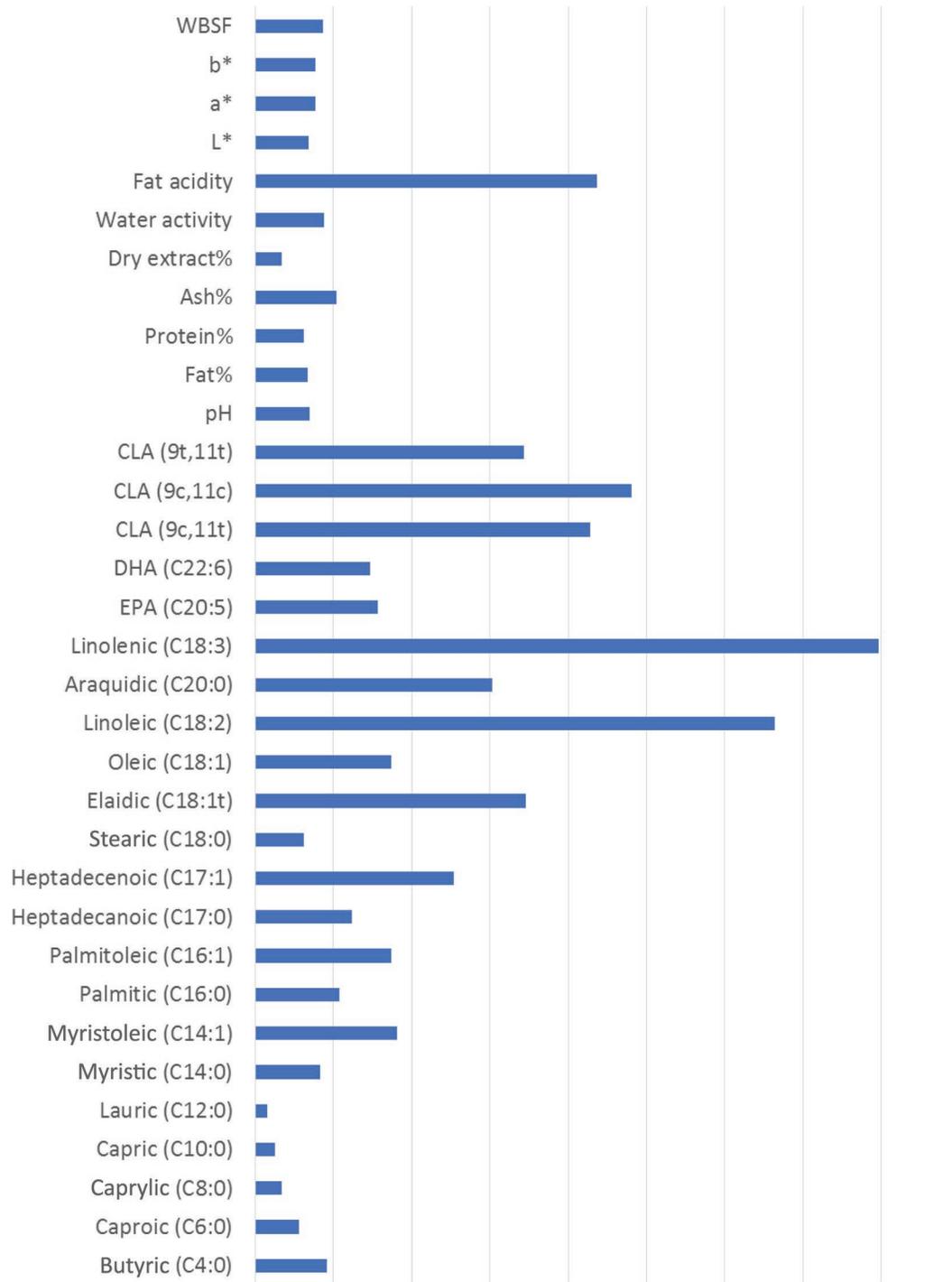


Figure 2. Quadratic weight of each of the inputs. t = *trans*; c = *cis*; EPA = eicosapentaenoic acid; DHA = docosahexaenoic acid; L* = lightness; a* = redness; b* = yellowness; WBSF = Warner-Bratzler shear force.

this enzyme participates in the production of free fatty acid in milk during storage (Li et al., 2014) as milk with a high SCC is more susceptible to lipolysis (Santos et al., 2003). Lipoprotein lipases are generally considered to be causative of flavor defaults such as rancidness in some dairy products (Li et al., 2014).

CONCLUSIONS

The results of this study showed that ANN constitute a reliable tool for predicting the somatic cell level in milk used to produce cheeses from the physicochemical data measured in them. The application of ANN has shown that linoleic acid, linolenic acid, and CLA isomers are the compounds that seem to be strongly related to the changes caused by the SCC in the composition of sheep milk. Furthermore, fat acidity is the parameter that makes the greatest contribution to the possible prediction of the SCC of the milk used in the production of sheep cheese. Application of ANN with a high number of inputs could be the key to establishing the effects of SCC on cheese quality together with the correlation that exists between enzyme activity and SCC levels.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors are grateful to the Regional Government of the Spanish region of Castilla y León (SA066/04) for its financial support.

REFERENCES

- Albenzio, M., M. Caroprese, A. Santillo, R. Marino, L. Taibi, and A. Sevi. 2004. Effects of somatic cell count and stage of lactation on the plasmin activity and cheese-making properties of ewe milk. *J. Dairy Sci.* 87:533–542.
- Albenzio, M., A. Santillo, M. Caroprese, L. Schena, D. E. Russo, and A. Sevi. 2011. Composition, indigenous proteolytic enzymes and coagulating behavior of ewe milk as affected by somatic cell count. *J. Dairy Res.* 78:442–447.
- AOAC International. 1995. *Official Methods of Analysis*, vol. 4, 16th ed. AOAC International, Arlington, VA.
- AOAC International. 2000. *Official Methods of Analysis of AOAC International*. 17th ed. AOAC International Gaithersburg, MD.
- Azzara, C. D., and P. S. Dimick. 1985. Lipoprotein lipase activity of milk from cows with prolonged subclinical mastitis. *J. Dairy Sci.* 68:3171–3175.
- Barile, D., J. D. Coisson, M. Arlorio, and M. Rinaldi. 2006. Identification of production area of Ossolano Italian cheese with chemometric complex approach. *Food Control* 17:197–206.
- Basheer, I. A., and M. Hajmeer. 2000. Artificial Neural Networks: Fundamentals, computing and design and application. *J. Microbiol. Methods* 43:3–31.
- Berry, M. J. A., and G. Linoff. 1997. *Data Mining Techniques: For Marketing, Sales and Customer Support*. John Wiley & Sons, New York, NY.
- Borguer, Z., and H. Guterman. 1997. Knowledge extraction from artificial neural network models. Pages 3030–3035 in *IEEE International Conference on Systems, Man and Cybernetics*, Orlando, FL.
- Boyazoglu, J., and P. Morand-Fehr. 2001. Mediterranean dairy sheep and goat products and their quality. A critical review. *Small Rumin. Res.* 40:1–11.
- Carboni, P., C. Manis, I. Ibba, M. Contu, V. Coroneo, and P. Scano. 2017. Compositional profile of ovine milk a high somatic cell count: A metabolomics approach. *Int. Dairy J.* 69:33–39.
- Cevoli, C., L. Cerretani, A. Gori, M. F. Caboni, T. Gallina Toschi, and A. Fabbri. 2011. Classification of Pecorino cheeses using electronic nose combined with artificial neural network and comparison with GC-MS analysis of volatile compounds. *Food Chem.* 129:1315–1319.
- Cevoli, C., A. Gori, M. Nocetti, L. Cuibus, M. F. Caboni, and A. Fabbri. 2013. FT-NIR and FT-MIR spectroscopy to discriminate competitors, non-compliance and compliance grated Parmigiano Reggiano cheese. *Food Res. Int.* 52:214–220.
- CIE. 1975. *Commission Internationale de L'Eclairage*, 18th session, Publication 23. London, UK.
- Coelho, V. R. P., C. E. C. Rodrigues, C. H. Corassin, C. F. Balthazar, L. P. Cappato, M. V. S. Ferreira, A. G. Bruzz, and C. A. F. Oliveira. 2017. Milk with different somatic cells counts and the physicochemical, microbiological characteristics and fatty acid profile of pasteurized milk cream: Is there an association? *Int. J. Food Sci. Technol.* 52:2631–2636.
- Concha, C., O. Holmberg, and G. Astrom. 1986. Cells found in no infected and *Staphylococcus*-infected bovine mammary quarter and their ability to phagocytose fluorescent microspheres. *Zentralbl. Veterinarmed. B* 33:371–378.
- Cruz, A. G., R. S. Cadena, M. B. V. B. Alvaro, A. S. Sant'Ana, C. A. F. Oliveira, J. A. F. Faria, H. M. A. Bolini, and M. M. C. Ferreira. 2013. Assessing the use of different chemometric techniques to discriminate low-fat and full-fat yogurts. *Lebensm. Wiss. Technol.* 50:210–214.
- Cruz, A. G., R. S. Cadena, J. A. F. Faria, C. A. F. Oliveira, R. N. Cavalcanti, E. Bona, H. M. A. Bolini, and M. A. A. P. da Silva. 2011. Consumer acceptability and purchase intent of probiotic yoghurt with added glucose oxidase using sensometrics, artificial neural networks and logistic regression. *Int. J. Dairy Technol.* 64:549–556.
- Druz, A. G., E. H. M. Walter, R. S. Cadena, J. A. F. Faria, H. M. A. Bolini, and A. M. Fratini Fileti. 2009. Monitoring the authenticity of low-fat yogurts by an artificial neural network. *J. Dairy Sci.* 92:4797–4804.
- Demuth, H., and M. Beale. 1994. *Neuronal Network Toolbox User's Guide*. The Mathworks Inc., Natick, MA.
- Dulin, A. M., M. J. Paape, W. D. Schultze, and B. T. Weinland. 1983. Effect of parity, stage of lactation and intramammary infection on concentration of somatic cells and cytoplasmic particles in goat milk. *J. Dairy Sci.* 66:2426–2433.
- EC. 2004. EC 853/2004 Regulation of the European Parliament and of the Council of 29 April 2004 laying down specific hygiene rules for on the hygiene of foodstuffs.
- Etzion, Y., R. Linker, U. Cogan, and I. Shmulevich. 2004. Determination of protein concentration in raw milk by mid-infrared Fourier transform infrared/attenuated total reflectance spectroscopy. *J. Dairy Sci.* 87:2779–2788.
- Fox, P. F., T. P. Guinee, T. M. Cogan, and P. L. H. McSweeney. 2000. *Fundamentals of Cheese Science*. Aspen Publishers Inc., Gaithersburg, MD.
- Funahashi, H., and J. Horiuchi. 2008. Characteristics of the churning process in continuous butter manufacture and modelling an artificial neural network. *Int. Dairy J.* 18:323–328.
- Gargouri, H., H. Hamed, and A. Elfeki. 2008. Total and differential bulk cow milk somatic cell counts and their relation with lipolysis. *Livest. Sci.* 113:274–279.
- Gonzalo, C., A. Tardáguila, A. Ariznabarreta, M. Romeo, V. Monitoro, M. D. Pérez-Guzmán, and Y. J. C. Marco. 2000. Recuentos de células somáticas en el ganado ovino lechero y estrategias de control. Situación en España. (Somatic cell counts in ovine dairy herd and control strategies. Spanish situation). *Ovis* 66:21–27.
- Gori, A., R. M. Maggio, L. Cerretani, M. Nocetti, and M. F. Caboni. 2012. Discrimination of grated cheeses by Fourier transform infra-

- red spectroscopy coupled with chemometric techniques. *Int. Dairy J.* 23:115–120.
- Goyal, S., and G. K. Goyal. 2012. Artificial neural networks for dairy industry: A review. *J. Advanced Computer Sci. Technol.* 1:101–105.
- He, Y., S. Feng, X. Deng, and X. Li. 2005. Study on lossless discrimination of varieties of yogurt using the Visible/NIR-spectroscopy. *Food Res. Int.* 39:645–650.
- Hettinga, K. A., H. J. F. van Valenberg, and A. C. M. van Hooijdonk. 2008. Quality control of raw cow's milk by headspace analysis. *Int. Dairy J.* 18:506–513.
- Horiuchi, J., T. Shimada, H. Funahashi, K. Tada, M. Kobayashi, and T. Kanno. 2004. Artificial neural network model with a culture database for prediction of acidification step in cheese production. *J. Food Eng.* 63:459–465.
- IDF. 1969. International Standard. FIL-IDF 1A:1969 (International Dairy Federation, Brussels, Belgium.).
- IDF. 1982. Cheese and processed cheese. Determination of the total solid content. Standard 4A. International Dairy Federation, Brussels, Belgium.
- Irigoyen, A., J. M. Izco, F. C. Ibañez, and P. Torre. 2000. Evaluation of the effect of rennet type on casein proteolysis in an ovine milk cheese by means of capillary electrophoresis. *J. Chromatogr. A* 881:59–67.
- ISO. (International Organization for Standardization). 1975. Cheese. Determination of fat content. Van Gulik method (ISO 3433). ISO, Geneva, Switzerland.
- ISO. 2001. ISO 14156:2001. Milk and milk products. Extraction methods for lipids and liposoluble compounds. ISO, Geneva, Switzerland.
- Jaeggi, J. J., S. Govindasamy-Lucey, Y. M. Berger, M. E. Johnson, B. C. McKusick, D. L. Thomas, and W. L. Wendorff. 2003. Hard ewe's milk cheese manufactured from milk of three different groups of somatic cell counts. *J. Dairy Sci.* 86:3082–3089.
- Jimenez-Marquez, S. A., C. Lacroix, and J. Thibault. 2003. Impact of modeling parameters on the prediction of cheese moisture using neural networks. *Comput. Chem. Eng.* 27:631–646.
- Jimenez-Marquez, S. A., J. Thibault, and C. Lacroix. 2005. Prediction of moisture in cheese of commercial production using neural networks. *Int. Dairy J.* 15:1156–1174.
- Kalantzopoulos, G., J. P. Dubeuf, F. Vallerand, A. Pirisi, E. Casalta, A. Laurte, and T. Trujillo. 2004. Characteristics of sheep and goat milks: Quality and hygienic factors for the sheep and goat dairy sectors. *Bulletin of IDF* 390:17–28.
- Karoui, R., and J. De Baerdemaeker. 2007. A review of the analytical methods coupled with chemometric tools for the determination of the quality and identity of dairy products. *Food Chem.* 102:621–640.
- Khanmohammadi, M., A. B. Gramarudi, K. Ghasemi, S. Garrigues, and M. de la Guardia. 2009. Artificial neural network for quantitative determination of total protein in yogurt by infrared spectrometry. *Microchem. J.* 91:47–52.
- Laurinaviciute, V., J. Siugzdaitė, and D. Urbsienė. 2004. Quality and composition of milk with different somatic cell count of two breeds of dairy goats. *Med. Veter.* 60:1168–1170.
- Le Roux, Y., F. Laurent, and F. Moussaoui. 2003. Polymorphonuclear proteolytic activity and milk composition change. *Vet. Res.* 34:629–645.
- Leitner, G., M. Chaffer, Y. Caraso, E. Ezra, D. Kababea, M. Winkler, M. Winkler, A. Glickman, and A. Saran. 2003. Udder infection and milk somatic cell count, NAGase activity and milk composition—fat, protein and lactose in Israeli—Assaf and Awassi sheep. *Small Rumin. Res.* 49:157–164.
- Leitner, G., E. Shoshani, O. Krifucks, M. Chaffer, and A. Saran. 2000. Milk leucocyte population patterns in bovine udder infection of different etiology. *J. Vet. Med. B* 47:581–589.
- Li, N., R. Richoux, M. Boutinaud, P. Martín, and V. Gagnaire. 2014. Role of somatic cells on dairy processes and products: A review. *Dairy Sci. Technol.* 94:517–538.
- Lurueña-Martínez, M. A., C. Palacios, A. M. Vivar-Quintana, and I. Revilla. 2010a. Effect of the addition of calcium soap to ewes' diet on fatty acid composition of ewe milk and subcutaneous fat of suckling lambs reared on ewe milk. *Meat Sci.* 84:677–683.
- Lurueña-Martínez, M. A., I. Revilla, P. Severiano-Pérez, and A. M. Vivar-Quintana. 2010b. The influence of breed on the organoleptic characteristics of Zamorano sheep's raw milk cheese and its assessment by instrumental analysis. *Int. J. Dairy Technol.* 63:216–223.
- Marino, R., T. Considine, A. Sevi, P. L. H. McSweeney, and A. L. Kelly. 2005. Contribution of proteolytic activity associated with somatic cells in milk to cheese ripening. *Int. Dairy J.* 15:1026–1033.
- Menzies, P. I., and Z. S. Ramanoo. 2001. Mastitis of sheep and goats. *Vet. Clin. North Am. Food Anim. Pract.* 17:333–358.
- Munro, G. L., P. A. Grieve, and B. J. Kitchen. 1984. Effects of mastitis on milk yield, milk composition, processing properties and yield and quality of milk products. *Aust. J. Dairy Technol.* 39:7–16.
- Nudda, A., M. Feligini, G. Battacone, N. P. P. Macciotta, and G. Pulina. 2003. Effects of lactation stage, parity, β -lactoglobulin genotype and milk SCC on whey protein composition in Darda dairy ewes. *Ital. J. Anim. Sci.* 2:29–39.
- O'Farrell, I. P., J. J. Sheehan, M. G. Wilkinson, D. Harrington, and A. L. Kelly. 2002. Influence of addition of plasmin or mastitis milk to cheese milk on quality of smear-ripened cheese. *Lait* 82:305–316.
- Paquet, J., C. Lacroix, and J. Thibault. 2000. Modeling of pH and acidity for industrial cheese production. *J. Dairy Sci.* 83:2393–2409.
- Pavia, M., A. J. Trujillo, E. Sendra, B. Guamis, and V. Ferregut. 2000. Free fatty acid content of Manchego-type cheese salted by brine vacuum impregnation. *Int. Dairy J.* 10:563–568.
- Pillonel, L., U. Bütikofer, H. Schlichtherle-Cerny, R. Tabacchi, and J. O. Bosset. 2005. Geographic origin of European Emmental. Use of discriminant analysis and artificial neural network for classification purposes. *Int. Dairy J.* 15:557–562.
- Pinto, G., S. Caira, M. A. Nicolai, R. Mauriello, M. Cuollo, A. Pirisi, G. Piredda, L. Chianese, and F. Addeo. 2013. Proteolysis and partial dephosphorylation of casein are affected by high somatic cell counts in sheep milk. *Food Res. Int.* 53:510–521.
- Pirisi, A., G. Piredda, M. Corona, M. Pes, S. Pintus, and A. Ledda. 2000. Influence of somatic cell count on ewe's milk composition, cheese yield and cheese quality. Pages 47–59 in *Proc. 6th Great Lakes Dairy Sheep Symposium*, Ontario, Canada.
- Pirisi, A., G. Piredda, F. Podda, and S. Pintus. 1996. Effect of somatic cell count on sheep milk composition and cheese making properties. Pages 241–251 in *Somatic Cells and Milk of Small Ruminants*. EAAP Publ. no. 77. R. Rubino, ed. Wageningen Press, Wageningen, the Netherlands.
- Poutrel, B. 1981. Les mammites de la chèvre et de la brebis. Pages 214–233 in *Proc. 6ème Journées de la Recherche Ovine et Caprine*, Paris, France.
- Revilla, I., M. A. Lurueña-Martínez, and A. M. Vivar-Quintana. 2009a. Influence of somatic cell counts and breed on physico-chemical and sensory characteristics of hard ewes'-milk cheeses. *J. Dairy Res.* 76:283–289.
- Revilla, I., J. M. Rodríguez-Nogales, and A. M. Vivar-Quintana. 2007. Proteolysis and texture of hard ewes' milk cheese during ripening as affected by somatic cell counts. *J. Dairy Res.* 74:127–136.
- Revilla, I., J. M. Rodríguez-Nogales, and A. M. Vivar-Quintana. 2009b. Effect of somatic cell counts on ewes' milk protein profile and cheese-making properties in different sheep breeds reared in Spain. *J. Dairy Res.* 76:210–215.
- Revilla, I., J. M. Rodríguez-Nogales, and A. M. Vivar-Quintana. 2011. Effects of somatic cells on the protein profile of hard ovine cheese produced from different breeds. *J. Dairy Res.* 78:279–286.
- Rodríguez-Nogales, J. M., A. M. Vivar-Quintana, and I. Revilla. 2007. Influence of somatic cell count and breed on capillary electrophoretic protein profiles of ewes' milk: A chemometric study. *J. Dairy Sci.* 90:3187–3196.
- Rohm, H., and D. Jaros. 1997. Color of hard cheese. Factors of influence and relation to compositional parameters. *Zeitschrift für Lebensmitteluntersuchung und -Forschung A* 204:259–264.
- Sánchez-Macias, D., M. Fresno, I. Moreno-Indias, N. Castro, A. Morales-de-laNuez, S. Álvarez, and A. Argüello. 2010. Physicochemi-

- cal analysis of full-fat, reduced-fat, and low-fat artisan-style goat cheese. *J. Dairy Sci.* 93:3950–3956.
- Santos, M. V., Y. Ma, Z. Caplan, and D. M. Barbano. 2003. Sensory threshold of off-flavors caused by proteolysis and lipolysis in milk. *J. Dairy Sci.* 86:1601–1607.
- Sepúlveda-Varas, P., K. L. Proudfoot, D. M. Weary, and M. A. von Keyserlingk. 2014. Changes in behavior of dairy cows with clinical mastitis. *Appl. Anim. Behav. Sci.* 175:8–13.
- Singh, R. R. B., A. P. Ruhil, D. K. Jain, S. S. Patel, and G. R. Patil. 2009. Prediction of sensory quality of UHT milk—A comparison of kinetic and neural network approaches. *J. Food Eng.* 92:146–151.
- Soto-Barajas, M. C., M. I. González-Martín, J. Salvador-Esteban, J. M. Hernández-Hierro, V. Moreno-Rodilla, A. M. Vivar-Quintana, I. Revilla, I. Lobos Ortega, R. Morón-Sancho, and B. Curto-Diego. 2013. Prediction of the type of milk and degree of ripening in cheese by means of artificial neural networks with data concerning fatty acids and near infrared spectroscopy. *Talanta* 116:50–55.
- Sousa, M. J., Y. Ardö, and P. L. H. McSweeney. 2001. Advances in the study of proteolysis during cheese ripening. *Int. Dairy J.* 11:327–345.
- Souza, S. S., A. G. Cruz, E. H. M. Walter, J. A. F. Faria, R. M. S. Celeghini, M. M. C. Ferreira, D. Grantao, and A. S. Sant’Ana., 2011. Monitoring the authenticity of Brazilian UHT milk: A chemometric approach. *Food Chem.* 124:692–695.
- Verdini, R. A., S. E. Zorrilla, A. C. Rubiolo, and S. Nakai. 2007. Multivariate statistical methods for Port Salut Argentino cheese analysis based on ripening time, storage conditions, and sampling sites. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 86:60–67.
- Vlaeminck, B., V. Fievez, S. Tamminga, R. J. Dewhurst, A. van Vuuren, D. De Brabander, and D. Demeyer. 2006. Milk odd- and branched-chain fatty acids in relation to the rumen fermentation pattern. *J. Dairy Sci.* 89:3954–3964.
- Zeppa, G., M. Giordano, M. Bertolino, and V. Gerbi. 2005. Application of artificial neural network on mono- and sesquiterpenes compounds determined by headspace solid-phase microextraction-gas chromatography–mass spectrometry for Piedmont ricotta cheese traceability. *J. Chromatogr. A* 1071:247–253.
- Zeppa, G., M. Giordano, V. Gerbi, and M. Arlorio. 2003. Fatty acid composition of Piedmont “Ossolano” cheese. *Lait* 83:167–173.

VII. CONCLUSIONES

Conclusiones

Conclusión del artículo 1.

Un modelo analítico basado en la utilización conjunta de la espectroscopía NIR y el procesamiento de sus resultados a través de una ANN, puede predecir parámetros sensoriales de jamón ibérico con una precisión relativamente alta, lo que permitiría su implementación en las líneas de procesado con el consiguiente ahorro en tiempo y coste derivados del análisis sensorial a través de un panel de cata.

Conclusión del artículo 2.

La información espectral de NIRS y el método quimiométrico MPLS, permiten predecir 10 de 20 parámetros sensoriales de chorizo evaluados por los catadores, sin embargo es el uso de las ANN lo que permite predecir todos los parámetros sensoriales (20) con valores de RSQ notablemente superiores. Así mismo, se ratifica la validez del uso de la metodología NIRS con el estadístico residuos RMS-X, para diferenciar muestras de chorizo acogido a etiquetas de calidad.

Conclusión del artículo 3.

Las ANN constituyen una herramienta eficaz para la clasificación de quesos en función del SCC presente en la leche de oveja utilizada para elaborarlos, y ello a partir de su análisis fisicoquímico y composicional. También se ha demostrado que el ácido linoleico, el ácido linolénico y los isómeros de CLA son los componentes que parecen tener mayor relación con los cambios causados por el SCC. Así mismo, el parámetro fisicoquímico de acidez de la grasa es el que más contribuye a la capacidad de clasificación de la red. La aplicación de las ANN, junto con la correlación existente entre la actividad enzimática y los niveles de SCC, pueden ser clave para entender la repercusión del SCC en la calidad del queso.

A partir de las conclusiones obtenidas en estos trabajos se puede sacar como conclusión final de esta tesis doctoral que **las redes neuronales artificiales son una herramienta muy adecuada para su utilización en el sector de los productos asociados a Marcas de Calidad, permitiendo obtener excelentes resultados tanto en la predicción de parámetros sensoriales como en la clasificación de los productos en base a parámetros de calidad diferenciada.**

VIII.BIBLIOGRAFÍA

Bibliografía

- 10 librerías para machine learning en JavaScript - Analytics Lane. (n.d.). Retrieved June 6, 2021, from <https://www.analyticslane.com/2018/11/07/10-librerias-para-machine-learning-en-javascript/>
- Adebayo, S. E., Hashim, N., Abdan, K., Hanafi, M., & Zude-Sasse, M. (2017). Prediction of banana quality attributes and ripeness classification using artificial neural network. *Acta Horticulturae*, 1152, 335–344. <https://doi.org/10.17660/ActaHortic.2017.1152.45>
- Albanell, E., Cáceres, P., Caja, G., Molina, E., & Gargouri, A. (1999). Determination of fat, protein, and total solids in ovine milk by near-infrared spectroscopy. *Journal of AOAC International*, 82(3), 753–758. <https://doi.org/10.1093/jaoac/82.3.753>
- Albenzio, M., Caroprese, M., Santillo, A., Marino, R., Taibi, L., Sevi, A., Taili, L., & Sevi, A. (2004). Effects of somatic cell count and stage of lactation on the plasmin activity and cheese making properties of ewe milk. *Journal of Dairy Science*, 87(3), 533–542. [https://doi.org/10.3168/jds.S0022-0302\(04\)73194-X](https://doi.org/10.3168/jds.S0022-0302(04)73194-X)
- Albenzio, M., Santillo, A., Caroprese, M., Schena, L., Russo, D. E., & Sevi, A. (2011). Composition, indigenous proteolytic enzymes and coagulating behaviour of ewe milk as affected by somatic cell count. *Journal of Dairy Research*, 78(4), 442–447. <https://doi.org/10.1017/S0022029911000525>
- Albuquerque, T. G., Oliveira, M. B. P. P., & Costa, H. S. (2018). 25 years of European Union (EU) quality schemes for agricultural products and foodstuffs across EU Member States. In *Journal of the Science of Food and Agriculture* (Vol. 98, Issue 7, pp. 2475–2489). John Wiley and Sons Ltd. <https://doi.org/10.1002/jsfa.8811>
- Alhamdan, A. M., Fickak, A., & Atia, A. R. (2019). Evaluation of sensory and texture profile analysis properties of stored Khalal Barhi dates nondestructively using Vis/NIR spectroscopy. *Journal of Food Process Engineering*, 42(6), e13215. <https://doi.org/10.1111/jfpe.13215>
- Aliakbarian, B., Casale, M., Paini, M., Casazza, A. A., Lanteri, S., & Perego, P. (2015). Production of a novel fermented milk fortified with natural antioxidants and its analysis by NIR spectroscopy. *LWT*, 62(1), 376–383. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2014.07.037>
- Almeida, P. F., Alves, W. A. L., Farias, T. M. B., & Santana, J. C. C. (2012). Elaboración y clasificación sensorial de gelatinas de patas de pollos. Correlación usando redes neuronales artificiales. *Informacion Tecnologica*, 23(6), 129–136. <https://doi.org/10.4067/S0718-07642012000600014>
- Amodio, M. L., Ceglie, F., Chaudhry, M. M. A., Piazzolla, F., & Colelli, G. (2017). Potential of NIR spectroscopy for predicting internal quality and discriminating among strawberry fruits from different production systems. *Postharvest Biology and Technology*, 125, 112–121. <https://doi.org/10.1016/j.postharvbio.2016.11.013>

- Andrade Tepán, E. C. (2013). *Estudio de los principales tipos de redes neuronales y las herramientas para su aplicación*. Universidad de Cuenca (Ecuador).
- Atanassova, S., Naydenova, N., Kolev, T., Iliev, T., & Mihaylova, G. (2011). Near infrared spectroscopy for monitoring changes during yellow cheese ripening. *Agricultural Science and Technology*, 3(4), 390–394.
- Bahramparvar, M., Salehi, F., & Razavi, S. M. A. (2014). Predicting total acceptance of ice cream using artificial neural network. *Journal of Food Processing and Preservation*, 38(3), 1080–1088. <https://doi.org/10.1111/jfpp.12066>
- Balage, J. M., da Luz e Silva, S., Gomide, C. A., Bonin, M. de N., & Figueira, A. C. (2015). Predicting pork quality using Vis/NIR spectroscopy. *Meat Science*, 108, 37–43. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2015.04.018>
- Barile, D., Coisson, J. D., Arlorio, M., Rinaldi, M., Coisson, J. D., Arlorio, M., & Rinaldi, M. (2006). Identification of production area of Ossolano Italian cheese with chemometric complex approach. *Food Control*, 17(3), 197–206. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2004.10.016>
- Begley, T. H., Lanza, E., Norris, K. H., & Hruschka, W. R. (1984). Determination of Sodium Chloride in Meat by Near-Infrared Diffuse Reflectance Spectroscopy. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 32(5), 984–987. <https://doi.org/10.1021/jf00125a007>
- Bergonier, D., & Berthelot, X. (2003). New advances in Epizootiology and control of ewe mastitis. *Livestock Production Science*, 79, 1–16.
- Bergonier, D., De Crémoux, R., Rupp, R., Lagriffoul, G., & Berthelot, X. (2003). Mastitis of dairy small ruminants. *Veterinary Research*, 34(5), 689–716.
- Bertone, E., Venturello, A., Giraudo, A., Pellegrino, G., & Geobaldo, F. (2016). Simultaneous determination by NIR spectroscopy of the roasting degree and Arabica/Robusta ratio in roasted and ground coffee. *Food Control*, 59, 683–689. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2015.06.055>
- Betances-Salcedo, E., Revilla, I., Vivar-Quintana, A. M., & González-Martín, M. I. (2017). Flavonoid and antioxidant capacity of propolis prediction using near infrared spectroscopy. *Sensors (Switzerland)*, 17(7), 1647. <https://doi.org/10.3390/s17071647>
- Betances Salcedo, E. V. (2018). *Caracterización de la composición química y propiedades funcionales de los propóleos* (Issue Salamanca). Universidad de Salamanca.
- Beynon, J. (1988). Work Out Waves and Optics. In *Work Out Waves and Optics*. Macmillan Education UK. <https://doi.org/10.1007/978-1-349-10165-8>
- Bouhzam, I. (2020). *Aplicaciones de la Espectroscopia de Infrarrojo Cercano (NIR) para predecir el contenido y la actividad de agua del embutido tipo "Fuet"*.
- Boyazoglu, J., & Morand-Fehr, P. (2001). Mediterranean dairy sheep and goat products and their quality: A critical review. *Small Ruminant Research*, 40(1), 1–11. [https://doi.org/10.1016/s0921-4488\(00\)00203-0](https://doi.org/10.1016/s0921-4488(00)00203-0)
- Brereton, R. G. (1992). *Chemometrics: applications of mathematics and chemometrics, illustrated by case studies*.

- Brereton, R. G. (2003). *Chemometrics: data analysis for the laboratory and chemical plant*. John Wiley & Sons.
- Brethour, J. R. (1994). Estimating marbling score in live cattle from ultrasound images using pattern recognition and neural network procedures. *Journal of Animal Science*, 72(6), 1425–1432. <https://doi.org/10.2527/1994.7261425x>
- Brezmes Llecha, J. (2001). Diseño de una nariz electrónica para la determinación no destructiva del grado de la maduración de la fruta. In *Universidad Politécnica de Cataluña*. Universitat Politècnica de Catalunya.
- Byrne, C. E., Downey, G., Troy, D. J., & Buckley, D. J. (1998). Non-destructive prediction of selected quality attributes of beef by near-infrared reflectance spectroscopy between 750 and 1098 nm. *Meat Science*, 49(4), 399–409. [https://doi.org/10.1016/S0309-1740\(98\)00005-9](https://doi.org/10.1016/S0309-1740(98)00005-9)
- Caballero, D., Asensio, M., Fernández, C., Martín, N., & Silva, A. (2019). Determining Mandatory Nutritional Parameters for Iberian Meat Products Using a New Method Based on Near Infra-Red Reflectance Spectroscopy and Data Mining. *Meat Technology*, 60(2), 73–83. <https://doi.org/10.18485/meattech.2019.60.2.1>
- Cai, R., Wang, S., Meng, Y., Meng, Q., & Zhao, W. (2012). Rapid quantification of flavonoids in propolis and previous study for classification of propolis from different origins by using near infrared spectroscopy. *Analytical Methods*, 4(8), 2388–2395. <https://doi.org/10.1039/c2ay25184a>
- Campos, M. I., Antolín, G., Debán, L., & Pardo, R. (2018). Assessing the influence of temperature on NIRS prediction models for the determination of sodium content in dry-cured ham slices. *Food Chemistry*, 257, 237–242. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2018.02.131>
- Campos, M. I., Debán, L., Antolín, G., & Pardo, R. (2020). Evaluation by NIRS technology of curing process of ham with low sodium content. *Meat Science*, 163, 108075. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2020.108075>
- Campos, M. I., Mussons, M. L., Antolín, G., Debán, L., & Pardo, R. (2017). On-line prediction of sodium content in vacuum packed dry-cured ham slices by non-invasive near infrared spectroscopy. *Meat Science*, 126, 29–35. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2016.12.005>
- Cancilla, J. C. D., Wang, S. C., Díaz-Rodríguez, P., Matute, G., Cancilla, J. C. D., Flynn, D., & Torrecilla, J. S. (2014). Linking Chemical Parameters to Sensory Panel Results through Neural Networks To Distinguish Olive Oil Quality. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 62(44), 10661–10665. <https://doi.org/10.1021/jf503482h>
- Cerit, I., Yildirim, A., Ucar, M. K., Demirkol, A., Cosansu, S., & Demirkol, O. (2017). Estimation of antioxidant activity of foods using artificial neural networks. *JOURNAL OF FOOD AND NUTRITION RESEARCH*, 56(2), 138–148.
- Cevoli, C., Cerretani, L., Gori, A., Caboni, M. F. F., Gallina Toschi, T., Fabbri, A., Toschi, T. G., & Fabbri, A. (2011). Classification of Pecorino cheeses using electronic nose combined with artificial neural network and comparison with GC – MS analysis of volatile compounds. *Food Chemistry*, 129(3), 1315–1319. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2011.05.126>

- Cevoli, Chiara, Gori, A., Nocetti, M., Cuibus, L., Caboni, M. F., & Fabbri, A. (2013). FT-NIR and FT-MIR spectroscopy to discriminate competitors, non compliance and compliance grated Parmigiano Reggiano cheese. *Food Research International*, 52(1), 214–220. <https://doi.org/10.1016/J.FOODRES.2013.03.016>
- Chandraratne, M. R., Samarasinghe, S., Kulasiri, D., & Bickerstaffe, R. (2006). Prediction of lamb tenderness using image surface texture features. *Journal of Food Engineering*, 77(3), 492–499. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2005.06.063>
- Chandrasekaran, I., Panigrahi, S. S., Ravikanth, L., & Singh, C. B. (2019). Potential of Near-Infrared (NIR) Spectroscopy and Hyperspectral Imaging for Quality and Safety Assessment of Fruits: an Overview. In *Food Analytical Methods* (Vol. 12, Issue 11, pp. 2438–2458). Springer New York LLC. <https://doi.org/10.1007/s12161-019-01609-1>
- Chen, Yan, Cai, K., Tu, Z., Nie, W., Ji, T., Hu, B., Chen, C., & Jiang, S. (2018). Prediction of benzo[a]pyrene content of smoked sausage using back-propagation artificial neural network. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, 98(8), 3022–3030. <https://doi.org/10.1002/jsfa.8801>
- Chen, Yang, Bai, Y., Xu, N., Zhou, M., Li, D., Wang, C., & Hu, Y. (2017). Classification of Chinese Vinegars Using Optimized Artificial Neural Networks by Genetic Algorithm and Other Discriminant Techniques. *Food Analytical Methods*, 10(8), 2646–2656. <https://doi.org/10.1007/s12161-017-0829-y>
- Chicco, D., & Jurman, G. (2020). The advantages of the Matthews correlation coefficient (MCC) over F1 score and accuracy in binary classification evaluation. *BMC Genomics*, 21(1), 1–13. <https://doi.org/10.1186/s12864-019-6413-7>
- Chicco, D., Tötsch, N., & Jurman, G. (2021). The matthews correlation coefficient (Mcc) is more reliable than balanced accuracy, bookmaker informedness, and markedness in two-class confusion matrix evaluation. *BioData Mining*, 14(1), 1–22. <https://doi.org/10.1186/s13040-021-00244-z>
- Çinar, Ö., Hasar, H., & Kinaci, C. (2006). Modeling of submerged membrane bioreactor treating cheese whey wastewater by artificial neural network. *Journal of Biotechnology*, 123(2), 204–209. <https://doi.org/10.1016/j.jbiotec.2005.11.002>
- Collell, C., Gou, P., Arnau, J., & Comaposada, J. (2011). Non-destructive estimation of moisture, water activity and NaCl at ham surface during resting and drying using NIR spectroscopy. *Food Chemistry*, 129(2), 601–607. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2011.04.073>
- Corchado, J. M., Díaz, F., Borrajo, L., & Fernández, F. (2000). Redes neuronales artificiales : un enfoque práctico. In *Monografías da Universidade de Vigo. Tecnoloxía e ciencias experimentais* (Vol. 7). Departamento de Linguaxes e Sistemas Informáticos, Universidade de Vigo.
- Cortés, V., Blasco, J., Aleixos, N., Cubero, S., & Talens, P. (2019). Monitoring strategies for quality control of agricultural products using visible and near-infrared spectroscopy: A review. In *Trends in Food Science and Technology* (Vol. 85, pp. 138–148). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2019.01.015>

- Cozzi, G., Ferlito, J., Pasini, G., Contiero, B., & Gottardo, F. (2009). Application of near-infrared spectroscopy as an alternative to chemical and color analysis to discriminate the production chains of Asiago d'Allevio cheese. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 57(24), 11449–11454. <https://doi.org/10.1021/jf9018905>
- Cozzolino, D., Cowey, G., Lattey, K. A., Godden, P., Cynkar, W. U., Damberg, R. G., Janik, L., & Gishen, M. (2008). Relationship between wine scores and visible-near-infrared spectra of Australian red wines. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 391(3), 975–981. <https://doi.org/10.1007/s00216-008-2071-3>
- Da Rocha, R. A., Paiva, I. M., Anjos, V., Moreira Furtado, M. A., & Valenzuela Bell, M. J. (2015). Quantification of whey in fluid milk using confocal Raman microscopy and artificial neural network. *Journal of Dairy Science*, 98(6), 3559–3567. <https://doi.org/https://doi.org/10.3168/jds.2014-8548>
- Da Silva Sauthier, M. C., Paranhos Da Silva, E. G., Da Silva Santos, B. R., Ferreira Requião Silva, E., Da Cruz Caldas, J., Cavalcante Minho, L. A., Pinto dos Santos, A. M., & Lopes dos Santos, W. N. (2019). Screening of *Mangifera indica* L. functional content using PCA and neural networks (ANN). *Food Chemistry*, 273, 115–123. <https://doi.org/10.1016/J.FOODCHEM.2018.01.129>
- De Marchi, M., Manuelian, C. L., Ton, S., Manfrin, D., Meneghesso, M., Cassandro, M., & Penasa, M. (2017). Prediction of sodium content in commercial processed meat products using near infrared spectroscopy. *Meat Science*, 125, 61–65. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2016.11.014>
- De Marchi, M., Penasa, M., Zidi, A., & Manuelian, C. L. L. (2018). Invited review: Use of infrared technologies for the assessment of dairy products—Applications and perspectives. *Journal of Dairy Science*, 101(12), 10589–10604. <https://doi.org/10.3168/JDS.2018-15202>
- De Saja, J. A., Medina-Plaza, C., García-Hernández, C., Banerjee(Roy), R., Bandyopadhyay, R., Tudu, B., Bhattacharyya, N., Gomes, M. T. S. R., Ciosek, P., & Lvova, L. (2016). Electronic Noses and Tongues in Food Science. In M. L. R. Méndez (Ed.), *Electronic Noses and Tongues in Food Science*. Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-800243-8.00013-5>
- Dixit, Y., Casado-Gavaldà, M. P., Cama-Moncuñill, R., Cama-Moncuñill, X., Markiewicz-Keszycka, M., Cullen, P. J., & Sullivan, C. (2017). Developments and Challenges in Online NIR Spectroscopy for Meat Processing. *Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety*, 16(6), 1172–1187. <https://doi.org/10.1111/1541-4337.12295>
- Dos Santos Pereira, E. V., De Sousa Fernandes, D. D., Ugulino de Araújo, M. C., Dias Gonçalves Diniz, P. H., & Sucupira Maciel, M. I. (2020). Simultaneous determination of goat milk adulteration with cow milk and their fat and protein contents using NIR spectroscopy and PLS algorithms. *LWT*, 127, 109427. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2020.109427>
- Dos Santos Silva, E., Paranhos Da Silva, E. G., Dos Santos Silva, D., Galvão Novaes, C., Carqueija Amorim, F. A., Silva Dos Santos, M. J., & Almeida Bezerra, M. (2019). Evaluation of macro and micronutrient elements content from soft drinks using principal component analysis and Kohonen self-organizing maps. *Food Chemistry*, 273, 9–14. <https://doi.org/10.1016/J.FOODCHEM.2018.06.021>
- Draper, N. R. (1966). H. Smith, Applied regression analysis. *John Wiley & Sons, New York*, 407, 90.

- eAmbrosia. Registro de Indicaciones Geográficas de la UE.* (n.d.). Retrieved April 20, 2021, from <https://ec.europa.eu/info/food-farming-fisheries/food-safety-and-quality/certification/quality-labels/geographical-indications-register/#>
- Ellekjær, M. R., Hildrum, K. I., Næs, T., & Isaksson, T. (1993). Determination of the Sodium Chloride Content of Sausages by near Infrared Spectroscopy. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 1(2), 65–75. <https://doi.org/10.1255/jnirs.7>
- Encyclopedia of Machine Learning. (2010). In C. Sammut & G. I. Webb (Eds.), *Encyclopedia of Machine Learning*. Springer US. <https://doi.org/10.1007/978-0-387-30164-8>
- Escribano, S., Biasi, W. V., Lerud, R., Slaughter, D. C., & Mitcham, E. J. (2017). Non-destructive prediction of soluble solids and dry matter content using NIR spectroscopy and its relationship with sensory quality in sweet cherries. *Postharvest Biology and Technology*, 128, 112–120. <https://doi.org/10.1016/j.postharvbio.2017.01.016>
- Esteki, M., Simal-Gandara, J., Shahsavari, Z., Zandbaaf, S., Dashtaki, E., & Vander Heyden, Y. (2018). A review on the application of chromatographic methods, coupled to chemometrics, for food authentication. *Food Control*, 93, 165–182. <https://doi.org/10.1016/J.FOODCONT.2018.06.015>
- EUR-Lex - 02012R1151-20191214 - ES - EUR-Lex.* (n.d.). Retrieved April 19, 2021, from <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/ES/TXT/?uri=CELEX%3A02012R1151-20191214>
- EUR-Lex - 32012R1151 - ES - EUR-Lex.* (n.d.). Retrieved April 19, 2021, from <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/es/TXT/?uri=CELEX%3A32012R1151>
- EUR-Lex - 32014R0664 - ES - EUR-Lex.* (n.d.). Retrieved April 19, 2021, from <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/es/TXT/?uri=CELEX%3A32014R0664>
- EUR-Lex - 32014R0668 - ES - EUR-Lex.* (n.d.). Retrieved April 19, 2021, from <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/ES/TXT/?uri=celex%3A32014R0668>
- European Commission. (2004). Regulation of the European Parliament and of the Council of 29 April 2004 laying down specific hygiene rules for on the hygiene of foodstuffs, 853/2004/EC. *Official Journal*, 50(30/04/2004).
- Fawcett, T. (2006). An introduction to ROC analysis. *Pattern Recognition Letters*, 27(8), 861–874. <https://doi.org/10.1016/j.patrec.2005.10.010>
- Feng, C.-H. H., Makino, Y., Oshita, S., & García Martín, J. F. (2018). Hyperspectral imaging and multispectral imaging as the novel techniques for detecting defects in raw and processed meat products: Current state-of-the-art research advances. *Food Control*, 84, 165–176. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2017.07.013>
- Fernández-Cabanás, V. M., Garrido-Varo, A., Olmo, J. G., De Pedro, E., & Dardenne, P. (2007). Optimisation of the spectral pre-treatments used for Iberian pig fat NIR calibrations. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 87(1), 104–112.
- Fernández-Cabanás, V. M., Polvillo, O., Rodríguez-Acuña, R., Botella, B., & Horcada, A. (2011). Rapid determination of the fatty acid profile in pork dry-cured sausages by NIR spectroscopy. *Food Chemistry*, 124(1), 373–378. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2010.06.031>

- Ferrer-Gallego, R., Hernández-Hierro, J. M., Rivas-Gonzalo, J. C., & Escribano-Bailón, M. T. (2013). Evaluation of sensory parameters of grapes using near infrared spectroscopy. *Journal of Food Engineering*, 118(3), 333–339. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2013.04.019>
- Flórez López, R., & Fernández Fernández, J. M. (2008). *Las Redes neuronales artificiales: fundamentos teóricos y aplicaciones prácticas: Vol. 1ª ed.* (Netbiblo (Ed.)). Departamento de Dirección y Economía de la Empresa. Universidad de León.
- Fodslette Møller, M. (1993). A scaled conjugate gradient algorithm for fast supervised learning. *Neural Networks*, 6(4), 525–533. [https://doi.org/10.1016/S0893-6080\(05\)80056-5](https://doi.org/10.1016/S0893-6080(05)80056-5)
- Francisco Sutil, M., & Vega Cruz, P. I. (2002). *Modelado de un fermentador mediante redes neuronales* (P. LanchoBelén & S. L. Luis (Eds.)). Universidad de Salamanca (España). Departamento de Informática y Automática.
- Gaitán Jurado, A. J. (2010). *Aportaciones a la tecnología NIRS a la calidad de productos agroalimentarios*. Universidad de Córdoba, Servicio de Publicaciones.
- García Martínez, E. M. (2012). *Aplicación de la ley de Lambert-Beer en espectroscopía UV-visible*.
- García, R. K., Gandra, K. M., Block, J. M., & Barrera-Arellano, D. (2012). Neural networks to formulate special fats. *Grasas y Aceites*, 63(3), 245–252.
- Garrigues Baixauli, J. (2013). Implementación de algoritmos de redes neuronales artificiales de tipo Fuzzy Artmap y Multilayer Feed Forward con dispositivos electrónicos programables en sistemas de lenguas electrónicas para la clasificación de muestras y determinación de parámetros [Universitat Politècnica de València]. In *Riunet*. <https://doi.org/10.4995/Thesis/10251/30219>.
- Gaze, L. V., Oliveira, B. R., Ferrao, L. L., Granato, D., Cavalcanti, R. N., Conte Junior, C. A., Cruz, A. G., & Freitas, M. Q. (2015). Preference mapping of dulce de leche commercialized in Brazilian markets. *Journal of Dairy Science*, 98(3), 1443–1454. <https://doi.org/10.3168/JDS.2014-8470>
- Geladi, P., MacDougall, D., & Martens, H. (1985). Linearization and scatter-correction for near-infrared reflectance spectra of meat. *Applied Spectroscopy*, 39(3), 491–500.
- Ghasemi-Varnamkhasti, M., & Forina, M. (2014). NIR spectroscopy coupled with multivariate computational tools for qualitative characterization of the aging of beer. *Computers and Electronics in Agriculture*, 100, 34–40. <https://doi.org/10.1016/j.compag.2013.10.001>
- Giese, E., Winkelmann, O., Rohn, S., & Fritsche, J. (2018). Determining quality parameters of fish oils by means of ¹H nuclear magnetic resonance, mid-infrared, and near-infrared spectroscopy in combination with multivariate statistics. *Food Research International*, 106, 116–128. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2017.12.041>
- Giovenzana, V., Beghi, R., & Guidetti, R. (2014). Rapid evaluation of craft beer quality during fermentation process by vis/NIR spectroscopy. *Journal of Food Engineering*, 142, 80–86. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2014.06.017>
- Givens, D. I., De Boever, J. L., & Deaville, E. R. (1997). The principles, practices and some future applications of near infrared spectroscopy for predicting the nutritive value of foods for animals and humans. *Nutrition Research Reviews*, 10(1), 83–114. <https://doi.org/10.1079/nrr19970006>

- González-Martín, I., Hernández-Hierro, J. M., González-Pérez, C., Revilla, I., Vivar-Quintana, A., & Lobos Ortega, I. (2014). Potential of near infrared spectroscopy for the analysis of volatile components in cheeses. *LWT - Food Science and Technology*, 55(2), 666–673. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2013.10.008>
- González-Martín, I., Hernández-Hierro, J. M., Morón-Sancho, R., Salvador-Esteban, J., Vivar-Quintana, A., & Revilla, I. (2007). Determination of the percentage of milk (cow's, ewe's and goat's) in cheeses with different ripening times using near infrared spectroscopy technology and a remote reflectance fibre-optic probe. *Analytica Chimica Acta*, 604(2), 191–196. <https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/j.aca.2007.10.014>
- González-Martín, I., Hernández-Hierro, J. M., Revilla, I., Vivar-Quintana, A., & Lobos Ortega, I. (2011a). The mineral composition (Ca, P, Mg, K, Na) in cheeses (cow's, ewe's and goat's) with different ripening times using near infrared spectroscopy with a fibre-optic probe. *Food Chemistry*, 127(1), 147–152. <https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/j.foodchem.2010.12.114>
- González-Martín, M. I., Escuredo, O., Hernández-Jiménez, M., Revilla, I., Vivar-Quintana, A. M., Martínez-Martín, I., & Hernández-Ramos, P. (2020). Prediction of stable isotopes and fatty acids in subcutaneous fat of Iberian pigs by means of NIR: A comparison between benchtop and portable systems. *Talanta*, 224, 121817. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2020.121817>
- González-Martín, M. I., Escuredo, O., Revilla, I., Vivar-Quintana, A. M., Carmen Coello, M., Palacios Riocerezo, C., & Wells Moncada, G. (2015). Determination of the mineral composition and toxic element contents of propolis by near infrared spectroscopy. *Sensors (Switzerland)*, 15(11), 27854–27868. <https://doi.org/10.3390/s151127854>
- González-Martín, M. I., Fernández Bermejo, C., Hernández Hierro, J. M., & Sánchez González, C. I. (2009). Determination of hydroxyproline in cured pork sausages and dry cured beef products by NIRS technology employing a fibre-optic probe. *Food Control*, 20(8), 752–755. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2008.09.015>
- González-Martín, M. I., Revilla, I., Vivar-Quintana, A. M., & Betances Salcedo, E. V. (2017). Pesticide residues in propolis from Spain and Chile. An approach using near infrared spectroscopy. *Talanta*, 165, 533–539. <https://doi.org/10.1016/J.TALANTA.2016.12.061>
- González-Martín, M. I., Severiano-Pérez, P., Revilla, I., Vivar-Quintana, A. M., Hernández-Hierro, J. M., González-Pérez, C., & Lobos-Ortega, I. A. (2011). Prediction of sensory attributes of cheese by near-infrared spectroscopy. *Food Chemistry*, 127(1), 256–263. <https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/j.foodchem.2010.12.105>
- González Arrieta, A. (2000). *Identificación del arma y la munición en un disparo con técnicas conexionistas*. Ediciones Universidad de Salamanca.
- Gonzalo, C., Tardáguila, A., Ariznabarreta, A., Romeo, M., Montoro, V., Pérez Guzmán, M. D., & Marco, J. C. (2000). Recuentos de células somáticas en el ganado ovino lechero y estrategias de control. Situación en España. (Somatic cell counts in ovine dairy herd and control strategies. Spanish situation). *Ovis (Madrid)*, 66(66), 21–27.

- Górska-Horczyk, E., Horczyk, M., Guzek, D., Wojtasik-Kalinowska, I., & Wierzbicka, A. (2017). Chromatographic fingerprints supported by artificial neural network for differentiation of fresh and frozen pork. *Food Control*, 73, 237–244. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2016.08.010>
- Grassi, S., & Alamprese, C. (2018). Advances in NIR spectroscopy applied to process analytical technology in food industries. In *Current Opinion in Food Science* (Vol. 22, pp. 17–21). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.cofs.2017.12.008>
- Guiné, R. P. F. (2019). The Use of Artificial Neural Networks (ANN) in Food Process Engineering. *ETP International Journal of Food Engineering*, 5(1), 15–21. <https://doi.org/10.18178/ijfe.5.1.15-21>
- Henn, R., Kirchler, C. G., Grossgut, M. E., & Huck, C. W. (2017). Comparison of sensitivity to artificial spectral errors and multivariate LOD in NIR spectroscopy – Determining the performance of miniaturizations on melamine in milk powder. *Talanta*, 166, 109–118. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2017.01.035>
- Hernández-Jiménez, M., Hernández-Ramos, P., Martínez-Martín, I., Vivar-Quintana, A. M., González-Martín, I., & Revilla, I. (2020). Comparison of artificial neural networks and multiple regression tools applied to near infrared spectroscopy for predicting sensory properties of products from quality labels. *Microchemical Journal*, 159, 105459. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2020.105459>
- Hernández-Ramos, P. A., Vivar-Quintana, A. M., & Revilla, I. (2019). Estimation of somatic cell count levels of hard cheeses using physicochemical composition and artificial neural networks. *Journal of Dairy Science*, 102(2), 1014–1024. <https://doi.org/10.3168/jds.2018-14787>
- Hernández-Ramos, P., Vivar-Quintana, A. M., Revilla, I., González-Martín, M. I., Hernández-Jiménez, M., & Martínez-Martín, I. (2020). Prediction of sensory parameters of cured ham: A study of the viability of the use of nir spectroscopy and artificial neural networks. *Sensors (Switzerland)*, 20(19), 1–19. <https://doi.org/10.3390/s20195624>
- Hernández Hierro, J. M. (2008). *Utilización de la tecnología NIRS con sonda de fibra óptica para el control de la calidad de alfalfa* [Universidad de Salamanca]. <https://doi.org/10.14201/gredos.22596>
- Herschel, W. (1800). XIV. Experiments on the refrangibility of the invisible rays of the sun. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 90, 284–292. <https://doi.org/10.1098/rstl.1800.0015>
- Hildrum, K. I., Nilsen, B. N., Mielnik, M., & Næs, T. (1994). Prediction of sensory characteristics of beef by near-infrared spectroscopy. *Meat Science*, 38(1), 67–80. [https://doi.org/10.1016/0309-1740\(94\)90096-5](https://doi.org/10.1016/0309-1740(94)90096-5)
- Hilera González, J. R., & Martínez Hernando, V. J. (1995). Redes neuronales artificiales: fundamentos, modelos y aplicaciones. In *Madrid: Ra-ma* (Vols. 155–6). Ra-ma.
- Hitchman, S., Johnson, P., Bain, W., Craigie, C. R., & Reis, M. M. (2021). Short communication: Long term performance of near infrared spectroscopy to predict intramuscular fat content in New Zealand lamb. *Meat Science*, 108376. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2020.108376>

- Holroyd, S. E. (2013). The use of near infrared spectroscopy on milk and milk products. In *Journal of Near Infrared Spectroscopy* (Vol. 21, Issue 5, pp. 311–322). SAGE Publishing. <https://doi.org/10.1255/jnirs.1055>
- Horiuchi, J. I., Shimada, T., Funahashi, H., Tada, K., Kobayashi, M., & Kanno, T. (2004). Artificial neural network model with a culture database for prediction of acidification step in cheese production. *Journal of Food Engineering*, 63(4), 459–465. <https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2003.09.005>
- Höskuldsson, A. (1996). *Prediction Methods in Science and Technology.: Vol 1. Basic theory.*
- Hristova, V. K., & Ahmad, M. A. (2015). ESTIMATING DAIRY PRODUCT'S VISCOSITY WITH ARTIFICIAL NEURAL NETWORKING (ANN) MODEL. In F. of S. C. D. University. (Ed.), *PIRM-V'2015*.
- Huang, L., Zhao, J., Chen, Q., & Zhang, Y. (2014). Nondestructive measurement of total volatile basic nitrogen (TVB-N) in pork meat by integrating near infrared spectroscopy, computer vision and electronic nose techniques. *Food Chemistry*, 145, 228–236. <https://doi.org/10.1016/J.FOODCHEM.2013.06.073>
- Huang, X., Xin, J., & Zhao, J. (2011). A novel technique for rapid evaluation of fish freshness using colorimetric sensor array. *Journal of Food Engineering*, 105(4), 632–637. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2011.03.034>
- Huang, X., Xu, H., Wu, L., Dai, H., Yao, L., & Han, F. (2016). A data fusion detection method for fish freshness based on computer vision and near-infrared spectroscopy. *Analytical Methods*, 8(14), 2929–2935. <https://doi.org/10.1039/c5ay03005f>
- Inarejos-García, A. M., Gómez-Alonso, S., Fregapane, G., & Salvador, M. D. (2013). Evaluation of minor components, sensory characteristics and quality of virgin olive oil by near infrared (NIR) spectroscopy. *Food Research International*, 50(1), 250–258. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2012.10.029>
- Isasi Viñuela, P., & Galván León, I. M. (2003). *Redes de neuronas artificiales : un enfoque práctico.* Pearson Prentice Hall.
- ITACyL - Instituto Tecnológico Agrario de Castilla y León. (n.d.). Retrieved April 26, 2021, from <https://www.itacyl.es/>
- Jahani, R., Yazdanpanah, H., van Ruth, S. M., Kobarfard, F., Alewijn, M., Mahboubi, A., Faizi, M., Aliabadi, M. H. S., & Salamzadeh, J. (2020). Novel application of near-infrared spectroscopy and chemometrics approach for detection of lime juice adulteration. *Iranian Journal of Pharmaceutical Research*, 19(2), 34–44. <https://doi.org/10.22037/ijpr.2019.112328.13686>
- Jha, S. N., Narsaiah, K., Jaiswal, P., Bhardwaj, R., Gupta, M., Kumar, R., & Sharma, R. (2014). Nondestructive prediction of maturity of mango using near infrared spectroscopy. *Journal of Food Engineering*, 124, 152–157. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2013.10.012>
- Jiménez-Márquez, S. A., Lacroix, C., & Thibault, J. (2003). Impact of modeling parameters on the prediction of cheese moisture using neural networks. *Computers and Chemical Engineering*, 27(5), 631–646. [https://doi.org/10.1016/S0098-1354\(02\)00263-6](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(02)00263-6)
- Jiménez-Márquez, S. A., Thibault, J., & Lacroix, C. (2005). Prediction of moisture in cheese of commercial production using neural networks. *International Dairy Journal*, 15(11), 1156–1174. <https://doi.org/10.1016/j.idairyj.2004.12.005>

- Kamiloglu, S. (2019). Authenticity and traceability in beverages. *Food Chemistry*, 277, 12–24. <https://doi.org/10.1016/J.FOODCHEM.2018.10.091>
- Kasbe, M. S., Mujawar, T. H., Mule, S. S., Prabhakar, P., Shaligram, A. D., & Deshmukh, L. P. (2018). An advanced electronic nose (EN) system: Application to classification of tomato and mint. *AIP Conference Proceedings*, 1989(1), 020017. <https://doi.org/10.1063/1.5047693>
- Kaye, W. (1954). Near-infrared spectroscopy. I. Spectral identification and analytical applications. In *Spectrochimica Acta* (Vol. 6, Issue 4, pp. 257-E2). Elsevier. [https://doi.org/10.1016/0371-1951\(54\)80011-7](https://doi.org/10.1016/0371-1951(54)80011-7)
- Khadir, M. T. (2021). *Artificial Neural Networks in Food Processing*. De Gruyter. <https://doi.org/doi:10.1515/9783110646054>
- Khulal, U., Zhao, J., Hu, W., & Chen, Q. (2016). Nondestructive quantifying total volatile basic nitrogen (TVB-N) content in chicken using hyperspectral imaging (HSI) technique combined with different data dimension reduction algorithms. *Food Chemistry*, 197, 1191–1199. <https://doi.org/10.1016/J.FOODCHEM.2015.11.084>
- Kominakis, A. P., Abas, Z., Maltaris, I., & Rogdakis, E. (2002). A preliminary study of the application of artificial neural networks to prediction of milk yield in dairy sheep. *Computers and Electronics in Agriculture*, 35(1), 35–48. [https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/S0168-1699\(02\)00051-0](https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/S0168-1699(02)00051-0)
- Kubelka, P., & Munk, F. (1931). An article on optics of paint layers. *Z. Tech. Phys*, 12(593–601), 259–274.
- Lei, T., & Sun, D. W. (2019). Developments of nondestructive techniques for evaluating quality attributes of cheeses: A review. In *Trends in Food Science and Technology* (Vol. 88, pp. 527–542). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2019.04.013>
- Li, J., Tan, J., Martz, F. A., & Heymann, H. (1999). Image texture features as indicators of beef tenderness. *Meat Science*, 53(1), 17–22. [https://doi.org/10.1016/S0309-1740\(99\)00031-5](https://doi.org/10.1016/S0309-1740(99)00031-5)
- Li, J., Tan, J., & Shatadal, P. (2001). Classification of tough and tender beef by image texture analysis. *Meat Science*, 57(4), 341–346. [https://doi.org/10.1016/S0309-1740\(00\)00105-4](https://doi.org/10.1016/S0309-1740(00)00105-4)
- Li, X., Tsuta, M., Hayakawa, F., Nakano, Y., Kazami, Y., & Ikehata, A. (2021). Estimating the sensory qualities of tomatoes using visible and near-infrared spectroscopy and interpretation based on gas chromatography–mass spectrometry metabolomics. *Food Chemistry*, 343, 128470. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2020.128470>
- Liakos, K. G., Busato, P., Moshou, D., Pearson, S., & Bochtis, D. (2018). Machine learning in agriculture: A review. *Sensors (Switzerland)*, 18(8), 2674. <https://doi.org/10.3390/s18082674>
- Liu, C., Yang, S. X., & Deng, L. (2015). Determination of internal qualities of Newhall navel oranges based on NIR spectroscopy using machine learning. *Journal of Food Engineering*, 161, 16–23. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2015.03.022>
- Liu, D., Zeng, X.-A., & Sun, D.-W. (2013). NIR Spectroscopy and Imaging Techniques for Evaluation of Fish Quality—A Review. *Applied Spectroscopy Reviews*, 48(8), 609–628. <https://doi.org/10.1080/05704928.2013.775579>

- Liu, Y., Pu, H., & Sun, D.-W. (2017). Hyperspectral imaging technique for evaluating food quality and safety during various processes: A review of recent applications. *Trends in Food Science & Technology*, *69*, 25–35. <https://doi.org/10.1016/J.TIFS.2017.08.013>
- Lobos Ortega, I. A. (2011). *Utilización de la Tecnología NIRS con sonda de fibra óptica para el control de calidad en quesos a lo largo de su maduración*. Universidad de Salamanca.
- López, A., Arazuri, S., García, I., Mangado, J., & Jarén, C. (2013). A review of the application of near-infrared spectroscopy for the analysis of potatoes. In *Journal of Agricultural and Food Chemistry* (Vol. 61, Issue 23, pp. 5413–5424). American Chemical Society. <https://doi.org/10.1021/jf401292j>
- López Sánchez, D., Raveane, W., González Arrieta, A., & Takeyas, B. L. (2007). Introducción a la inteligencia artificial. *23*, *12*(32), 1.
- Løvland, A., & Wold, J. P. (2020). NIR Spectroscopic Techniques for Quality and Process Control in the Meat Industry. *Meat and Muscle Biology*, *4*(2). <https://doi.org/10.22175/mmb.10020>
- Lu, J., Tan, J., Shatadal, P., & Gerrard, D. E. (2000). Evaluation of pork color by using computer vision. *Meat Science*, *56*(1), 57–60. [https://doi.org/10.1016/S0309-1740\(00\)00020-6](https://doi.org/10.1016/S0309-1740(00)00020-6)
- Ma, J., Sun, D.-W., Pu, H., Wei, Q., & Wang, X. (2019). Protein content evaluation of processed pork meats based on a novel single shot (snapshot) hyperspectral imaging sensor. *Journal of Food Engineering*, *240*, 207–213. <https://doi.org/10.1016/J.JFOODENG.2018.07.032>
- Macho Aparicio, S. (2002). Metodologías analíticas basadas en espectroscopia de infrarrojo y calibración multivariante. Aplicación a la industria petroquímica. In *TDX (Tesis Doctorals en Xarxa)*. Universitat Rovira i Virgili.
- Magwaza, L. S., Opara, U. L., Nieuwoudt, H., Cronje, P. J. R. R. J. R., Saeys, W., & Nicolai, B. (2012). NIR Spectroscopy Applications for Internal and External Quality Analysis of Citrus Fruit-A Review. *Food and Bioprocess Technology*, *5*(2), 425–444. <https://doi.org/10.1007/s11947-011-0697-1>
- Mamani-Linares, W., Alomar, D., & Gallo, C. (2012). Potencial uso de espectroscopia de reflectancia en el infrarrojo cercano (NIRS) para identificación de charqui de bovino, llama y caballo. *Veterinaria México*, *43*(2).
- Martens, H., Jensen, S. A., & Geladi, P. (1983). Multivariate linearity transformation for near-infrared reflectance spectrometry. *Proceedings of the Nordic Symposium on Applied Statistics*, 205–234.
- Martín del Brío, B., & Sanz Molina, A. (2006). *Redes Neuronales y Sistemas Borrosos* (3ª Edición). Ra-ma.
- Massart, D. L., Vandeginste, B. G. M., Buydens, L. M. C., De Jong, S., Lewi, P. J., & Smeyers-Verbeke, J. (1997). *Handbook of chemometrics and qualimetrics: Part A* (Elsevier (Ed.)).
- Méndez, P., & Ibarra, J. (2014). Implementación de una red neuronal de convolución para el reconocimiento de poses en imágenes de rostros. *ACI Avances En Ciencias e Ingenierías*, *6*(2), A1–A6. <https://doi.org/10.18272/aci.v6i2.167>

- Millán Trujillo, F. R., & Ostoich Cuevas, Z. (2006). Predicción mediante redes neuronales artificiales de la transferencia de masa en frutas osmóticamente deshidratadas. *Interciencia*, 31(3), 206–210.
- Mishra, P., Verkleij, T., & Klont, R. (2021). Improved prediction of minced pork meat chemical properties with near-infrared spectroscopy by a fusion of scatter-correction techniques. *Infrared Physics & Technology*, 113, 103643. <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2021.103643>
- Mittal, G. S., Ramaswamy, R., Ahn, J., Balasubramaniam, V. M., Rodríguez Saona, L., & Yousef, A. E. (2013). Handbook of Farm, Dairy and Food Machinery Engineering. In *Handbook of Farm, Dairy and Food Machinery Engineering*. Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-385881-8.00018-5>
- Miyashita, Y., Itozawa, T., Katsumi, H., & Sasaki, S.-I. (1990). Comments on the NIPALS algorithm. *Journal of Chemometrics*, 4(1), 97–100. <https://doi.org/10.1002/cem.1180040111>
- Mlček, J., Rop, O., Dohnal, V., & Šustová, K. (2011). Application of near infrared spectroscopy to estimate selected free amino acids and soluble nitrogen during cheese ripening. *Acta Veterinaria Brno*, 80(3), 293–297. <https://doi.org/10.2754/avb201180030293>
- Moré, J. J. (1978). *The Levenberg-Marquardt algorithm: Implementation and theory* (pp. 105–116). Springer, Berlin, Heidelberg. <https://doi.org/10.1007/bfb0067700>
- Murray, I. (2004). Scattered information: philosophy and practice of near infrared spectroscopy. In *Near Infrared Spectroscopy: Proceedings of the 11th International Conference*.
- Ncama, K., Opara, U. L., Tesfay, S. Z., Fawole, O. A., & Magwaza, L. S. (2017). Application of Vis/NIR spectroscopy for predicting sweetness and flavour parameters of 'Valencia' orange (*Citrus sinensis*) and 'Star Ruby' grapefruit (*Citrus x paradisi* Macfad). *Journal of Food Engineering*, 193, 86–94. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2016.08.015>
- Nie, P., Xia, Z., Sun, D.-W., & He, Y. (2013). Application of Visible and Near Infrared Spectroscopy for Rapid Analysis of Chrysin and Galangin in Chinese Propolis. *Sensors*, 13(8), 10539–10549. <https://doi.org/10.3390/s130810539>
- Norris, K. H., & Butler, W. L. (1961). Techniques for Obtaining Absorption Spectra on Intact Biological Samples. *IRE Transactions on Bio-Medical Electronics*, 8(3), 153–157. <https://doi.org/10.1109/TBMEL.1961.4322890>
- Norris, K. H., & Williams, P. C. (1984). Optimization of mathematical treatments of raw near-infrared signal in the measurement of protein in hard red spring wheat. I. Influence of particle size. *Cereal Chemistry*, 61(2), 158–165.
- O'Reilly, R. C. (2014). *Comparison of Neural Network Simulators*.
- Orawan, C., Panwadee, S., & Bandit, S. (2016). Application of Artificial Neural Networks on growth prediction of *Staphylococcus aureus* in milk. *INTERNATIONAL FOOD RESEARCH JOURNAL*, 23(1), 415–418.
- Ortiz, M. C., Sarabia, L., García-Rey, R., & Luque de Castro, M. D. (2006). Sensitivity and specificity of PLS-class modelling for five sensory characteristics of dry-cured ham using visible and near infrared spectroscopy. *Analytica Chimica Acta*, 558(1), 125–131. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2005.11.038>

- Osborne, B. G. (1986). Applications of near infrared spectroscopy in food analysis. *Near Infrared Spectroscopy in Food Analysis*, 117–161.
- Ouyang, Q., Liu, Y., Chen, Q., Zhang, Z., Zhao, J., Guo, Z., & Gu, H. (2017). Intelligent evaluation of color sensory quality of black tea by visible-near infrared spectroscopy technology: A comparison of spectra and color data information. *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 180, 91–96. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2017.03.009>
- Pajares Martinsanz, G., & Santos Peñas, M. (2005). *Inteligencia artificial e ingeniería del conocimiento*. Ra-ma.
- Palma Méndez, J. T., & Marín Morales, R. (2008). *Inteligencia artificial. Técnicas, métodos y aplicaciones*. MacGraw-Hill.
- Pan, L., Zhang, Q., Zhang, W., Sun, Y., Hu, P., & Tu, K. (2016). Detection of cold injury in peaches by hyperspectral reflectance imaging and artificial neural network. *Food Chemistry*, 192, 134–141. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2015.06.106>
- Paquet, J., Lacroix, C., & Thibault, J. (2000). Modeling of pH and Acidity for Industrial Cheese Production. *Journal of Dairy Science*, 83, 2393–2409. [https://doi.org/10.3168/jds.S0022-0302\(00\)75129-0](https://doi.org/10.3168/jds.S0022-0302(00)75129-0)
- Patel, N., Toledo-Alvarado, H., Cecchinato, A., & Bittante, G. (2020). Predicting the Content of 20 Minerals in Beef by Different Portable Near-Infrared (NIR) Spectrometers. *Foods*, 9(10), 1389. <https://doi.org/10.3390/foods9101389>
- Peguero Gutiérrez, A. (2010). La espectroscopia NIR en la determinación de propiedades físicas y composición química de intermedios de producción y productos acabados. In *Universidad Autónoma de Barcelona, Barcelona*. Universitat Autònoma de Barcelona.
- Peña, W. E. L., Minim, L. A., Luera Peña, W. E., & Minim, L. A. (2001). Aplicación de Redes Neuronales Artificiales en la modelización del tratamiento térmico de alimentos. *Ciencia y Tecnología Alimentaria*, 3(2), 81–88. <https://doi.org/10.1080/11358120109487650>
- Pérez-Magariño, S., Ortega-Heras, M., González-San José, M. L., & Boger, Z. (2004). Comparative study of artificial neural network and multivariate methods to classify Spanish DO rose wines. *Talanta*, 62(5), 983–990. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2003.10.019>
- Pérez-Santaescolástica, C., Fraeye, I., Barba, F. J., Gómez, B., Tomasevic, I., Romero, A., Moreno, A., Toldrá, F., & Lorenzo, J. M. (2019). Application of non-invasive technologies in dry-cured ham: An overview. In *Trends in Food Science and Technology* (Vol. 86, pp. 360–374). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2019.02.011>
- Pillonel, L., Badertscher, R., Casey, M., Meyer, J., Rossmann, A., Schlichtherle-Cerny, H., Tabacchi, R., & Bosset, J. O. (2005). Geographic origin of European Emmental cheese: Characterisation and descriptive statistics. *International Dairy Journal*, 15(6), 547–556. <https://doi.org/10.1016/j.idairyj.2004.07.028>
- Pillonel, L., Bütikofer, U., Schlichtherle-Cerny, H., Tabacchi, R., & Bosset, J. O. (2005). Geographic origin of European Emmental. Use of discriminant analysis and artificial neural network for classification purposes. *The Fourth IDF Symposium on Cheese: Ripening, Characterization and Technology*, 15(6–9), 557–562. <https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/j.idairyj.2004.10.010>

- Plans, M., Simó, J., Casañas, F., del Castillo, R. R., Rodríguez-Saona, L. E., & Sabaté, J. (2014). Estimating sensory properties of common beans (*Phaseolus vulgaris* L.) by near infrared spectroscopy. *Food Research International*, 56, 55–62. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2013.12.003>
- Ponce Cruz, P. (2011). *Inteligencia artificial con aplicaciones a la ingeniería* (Vol. 1a). Marcombo.
- Poonia, A., Jha, A., Sharma, R., Singh, H. B., Rai, A. K., & Sharma, N. (2017). Detection of adulteration in milk: A review. *International Journal of Dairy Technology*, 70(1), 23–42. <https://doi.org/10.1111/1471-0307.12274>
- Porep, J. U., Kammerer, D. R., & Carle, R. (2015). On-line application of near infrared (NIR) spectroscopy in food production. In *Trends in Food Science and Technology* (Vol. 46, Issue 2, pp. 211–230). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2015.10.002>
- Powers, D. (2008). Evaluation: From Precision, Recall and F-Factor to ROC, Informedness, Markedness & Correlation. *Mach. Learn. Technol.*, 2.
- Prevolnik, M., Andronikov, D., Žlender, B., Font-i-Furnols, M., Novič, M., Škorjanc, D., & Čandek-Potokar, M. (2014). Classification of dry-cured hams according to the maturation time using near infrared spectra and artificial neural networks. *Meat Science*, 96(1), 14–20. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2013.06.013>
- Prevolnik, Maja, Čandek-Potokar, M., Novič, M., & Škorjanc, D. (2009). An attempt to predict pork drip loss from pH and colour measurements or near infrared spectra using artificial neural networks. *Meat Science*, 83(3), 405–411. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2009.06.015>
- Prieto, N., Pawluczyk, O., Russell Dugan, M. E., & Lynn Aalhus, J. (2017). A Review of the Principles and Applications of Near-Infrared Spectroscopy to Characterize Meat, Fat, and Meat Products. *Applied Spectroscopy*, 71(7), 1403–1426. <https://doi.org/10.1177/0003702817709299>
- Priyashantha, H., Höjer, A., Saedén, K. H., Lundh, Å., Johansson, M., Bernes, G., Geladi, P., & Hetta, M. (2020). Use of near-infrared hyperspectral (NIR-HS) imaging to visualize and model the maturity of long-ripening hard cheeses. *Journal of Food Engineering*, 264, 109687. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2019.109687>
- Przybył, K., Gawalek, J., Koszela, K., Wawrzyniak, J., & Gierz, L. (2018). Artificial neural networks and electron microscopy to evaluate the quality of fruit and vegetable spray-dried powders. Case study: Strawberry powder. *Computers and Electronics in Agriculture*, 155, 314–323. <https://doi.org/10.1016/j.COMPAG.2018.10.033>
- Pu, Y. Y., O'Donnell, C., Tobin, J. T., & O'Shea, N. (2020). Review of near-infrared spectroscopy as a process analytical technology for real-time product monitoring in dairy processing. In *International Dairy Journal* (Vol. 103, p. 104623). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.idairyj.2019.104623>
- Qu, J.-H. H., Liu, D., Cheng, J.-H. H., Sun, D.-W. W., Ma, J., Pu, H., & Zeng, X.-A. A. (2015). Applications of Near-infrared Spectroscopy in Food Safety Evaluation and Control: A Review of Recent Research Advances. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, 55(13), 1939–1954. <https://doi.org/10.1080/10408398.2013.871693>

- Revilla, I., Escuredo, O., González-Martín, M. I., & Palacios, C. (2017). Fatty acids and fat-soluble vitamins in ewe's milk predicted by near infrared reflectance spectroscopy. Determination of seasonality. *Food Chemistry*, 214, 468–477. <https://doi.org/10.1016/J.FOODCHEM.2016.07.078>
- Revilla, I., González-Martín, I., Hernández-Hierro, J. M., Vivar-Quintana, A., González-Pérez, C., & Lurueña-Martínez, M. A. (2009). Texture evaluation in cheeses by NIRS technology employing a fibre-optic probe. *Journal of Food Engineering*, 92(1), 24–28. <https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2008.10.022>
- Revilla, I., Vivar-Quintana, A. M., González-Martín, I., Escuredo, O., & Seijo, C. (2017). The potential of near infrared spectroscopy for determining the phenolic, antioxidant, color and bactericide characteristics of raw propolis. *Microchemical Journal*, 134, 211–217. <https://doi.org/10.1016/J.MICROC.2017.06.006>
- Revilla, I., Vivar-Quintana, A. M., González-Martín, M. I., Hernández-Jiménez, M., Martínez-Martín, I., & Hernández-Ramos, P. (2020). NIR Spectroscopy for Discriminating and Predicting the Sensory Profile of Dry-Cured Beef “Cecina.” *Sensors*, 20(23), 6892. <https://doi.org/10.3390/s20236892>
- Revilla, Isabel, Lurueña-Martínez, M. A., & Vivar-Quintana, A. M. (2009). Influence of somatic cell counts and breed on physico-chemical and sensory characteristics of hard ewes'-milk cheeses. *Journal of Dairy Research*, 76(3), 283–289. <https://doi.org/10.1017/S0022029909004087>
- Revilla, Isabel, Rodríguez-Nogales, J. M., & Vivar-Quintana, A. M. (2007). Proteolysis and texture of hard ewes' milk cheese during ripening as affected by somatic cell counts. *Journal of Dairy Research*, 74(2), 127–136. <https://doi.org/10.1017/S0022029906002342>
- Revilla, Isabel, Rodríguez-Nogales, J. M., & Vivar-Quintana, A. M. (2009). Effect of somatic cell counts on ewes' milk protein profile and cheese-making properties in different sheep breeds reared in Spain. *Journal of Dairy Research*, 76(2), 210–215. <https://doi.org/10.1017/S0022029909004002>
- Ribeiro, J. S., Ferreira, M. M. C., & Salva, T. J. G. (2011). Chemometric models for the quantitative descriptive sensory analysis of Arabica coffee beverages using near infrared spectroscopy. *Talanta*, 83(5), 1352–1358. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2010.11.001>
- Ríos-Reina, R., García-González, D. L., Callejón, R. M., & Amigo, J. M. (2018). NIR spectroscopy and chemometrics for the typification of Spanish wine vinegars with a protected designation of origin. *Food Control*, 89, 108–116. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2018.01.031>
- Rodríguez-Otero, J. L., Hermida, M., & Centeno, J. (1997). Analysis of Dairy Products by Near-Infrared Spectroscopy: A Review. In *Journal of Agricultural and Food Chemistry* (Vol. 45, Issue 8). American Chemical Society. <https://doi.org/10.1021/jf960744p>
- Rodríguez Méndez, M. L., De Saja, J. A., Medina-Plaza, C., García-Hernández, C., Méndez, M. L. R., Saja, J. A. De, Medina-Plaza, C., & García-Hernández, C. (2016). Electronic Tongues for the Organoleptic Characterization of Wines BT. In M. L. R. Méndez (Ed.), *Electronic Noses and Tongues in Food Science* (pp. 265–273). Academic Press. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/B978-0-12-800243-8.00026-3>

- Romeo, M., Esnal, A., Gonzalez, L., & Marco, J. C. (1993). Ovine mastitis: relation between somatic cell count (SCC), milk yield and its composition. *Proceedings of the Third International Sheep Veterinary Conference*, 17, 227–228.
- Romeo, M., Ziluaga, I., & Marco, J. C. (1998). Diagnóstico in situ de la infección mamaria mediante palpación, California mastitis test y su seguimiento mediante recuento de células somáticas. *Ovis*, 59, 61–77.
- Rosenthal, B., Williams, P., Workman Jr, J. J., Reeves III, J. B., Ozaki, Y., Liu, Y., Noda, I., Czarnecki, M. A., Maeda, H., & Suzuki, M. (1996). *Near infrared spectroscopy: the future waves*. Nir Publications Chichester.
- Rumelhart, D. E., Hinton, G. E., & Williams, R. J. (1986). Learning representations by back-propagating errors. *Nature*, 323(6088), 533–536. <https://doi.org/10.1038/323533a0>
- Sadilek T. (2020). Utilization of food quality labels included in the european union quality schemes. *International Journal on Food System Dynamics*, 11(1), 72–83. <https://doi.org/10.18461/ijfsd.v11i1.40>
- Salguero-Chaparro, L., Baeten, V., Abbas, O., & Peña-Rodríguez, F. (2012). On-line analysis of intact olive fruits by vis-NIR spectroscopy: Optimisation of the acquisition parameters. *Journal of Food Engineering*, 112(3), 152–157. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2012.03.034>
- Salguero-Chaparro, L., Gaitán-Jurado, A. J., Ortiz-Somovilla, V., & Peña-Rodríguez, F. (2013). Feasibility of using NIR spectroscopy to detect herbicide residues in intact olives. *Food Control*, 30(2), 504–509. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2012.07.045>
- Sánchez, M. T., De La Haba, M. J., Benítez-López, M., Fernández-Novales, J., Garrido-Varo, A., & Pérez-Marín, D. (2012). Non-destructive characterization and quality control of intact strawberries based on NIR spectral data. *Journal of Food Engineering*, 110(1), 102–108. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2011.12.003>
- Sans, S., Ferré, J., Boqué, R., Sabaté, J., Casals, J., & Simó, J. (2020). Estimating sensory properties with near-infrared spectroscopy: A tool for quality control and breeding of “Calçots” (*Allium cepa* L.). *Agronomy*, 10(6), 828. <https://doi.org/10.3390/agronomy10060828>
- Savitzky, A., & Golay, M. J. E. (1964). Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures. *Analytical Chemistry*, 36(8), 1627–1639.
- Scalisi, A., & O’Connell, M. G. (2020). Application of visible/NIR spectroscopy for the estimation of soluble solids, dry matter and flesh firmness in stone fruits. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, jsfa.10832. <https://doi.org/10.1002/jsfa.10832>
- Series anuales*. (n.d.). Retrieved May 2, 2021, from <https://www.mapa.gob.es/es/alimentacion/temas/consumo-tendencias/panel-de-consumo-alimentario/series-anuales/default.aspx>
- Sheridan, C., O’Farrell, M., Lewis, E., Flanagan, C., Kerry, J., & Jackman, N. (2007). A comparison of CIE L* a* b* and spectral methods for the analysis of fading in sliced cured ham. *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics*, 9(6), S32–S39. <https://doi.org/10.1088/1464-4258/9/6/S06>

- Sirisomboon, P. (2018). NIR Spectroscopy for Quality Evaluation of Fruits and Vegetables. *Materials Today: Proceedings*, 5(10), 22481–22486. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2018.06.619>
- Soltanikazemi, M., & Abdanan Mehdizadeh, S. (2017). Classification of bitter and sweet olives using image processing and artificial neural networks during curing process in brine and water environments. *International Journal of Food Properties*, 20, 1954–1964. <https://doi.org/10.1080/10942912.2017.1360904>
- Soto-Barajas, M. C., González-Martín, M. I., Salvador-Esteban, J., Hernández-Hierro, J. M., Moreno-Rodilla, V., Vivar-Quintana, A. M., Revilla, I., Ortega, I. L., Morón-Sancho, R., & Curto-Diego, B. (2013). Prediction of the type of milk and degree of ripening in cheeses by means of artificial neural networks with data concerning fatty acids and near infrared spectroscopy. *Talanta*, 116, 50–55. <https://doi.org/10.1016/J.TALANTA.2013.04.043>
- Stangierski, J., Weiss, D., & Kaczmarek, A. (2019). Multiple regression models and Artificial Neural Network (ANN) as prediction tools of changes in overall quality during the storage of spreadable processed Gouda cheese. *European Food Research and Technology*, 245(11), 2539–2547. <https://doi.org/10.1007/s00217-019-03369-y>
- Stehman, S. V. (1997). Selecting and interpreting measures of thematic classification accuracy. *Remote Sensing of Environment*, 62(1), 77–89. [https://doi.org/10.1016/S0034-4257\(97\)00083-7](https://doi.org/10.1016/S0034-4257(97)00083-7)
- Talens, P., Mora, L., Morsy, N., Barbin, D. F., ElMasry, G., & Sun, D.-W. (2013). Prediction of water and protein contents and quality classification of Spanish cooked ham using NIR hyperspectral imaging. *Journal of Food Engineering*, 117(3), 272–280. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2013.03.014>
- Tan, F. J., Morgan, M. T., Ludast, L. I., Forrest, J. C., Gerrard, D. E., Ludas, L. I., Forrest, J. C., & Gerrard, D. E. (2000). Assessment of fresh pork color with color machine vision. *Journal of Animal Science*, 78(12), 3078–3085. <https://doi.org/10.2527/2000.78123078x>
- Teye, E., Anyidoho, E., Agbemafle, R., Sam-Amoah, L. K., & Elliott, C. (2020). Cocoa bean and cocoa bean products quality evaluation by NIR spectroscopy and chemometrics: A review. In *Infrared Physics and Technology* (Vol. 104, p. 103127). Elsevier B.V. <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2019.103127>
- Tian, Y. Q., McCall, D. G., Dripps, W., Yu, Q., & Gong, P. (2005). Using computer vision technology to evaluate the meat tenderness of grazing beef. *Food Australia*, 57(8), 322–326.
- Toledo-Martín, E. M., García-García, M. C., Gómez, P., Moreno-Rojas, J. M., González, A., Moya, M., Font, R., & Del Río-Celestino, M. (2014). Uso de la tecnología NIRS para la caracterización de la calidad físico-química en pimiento. *XIII Jornadas Del Grupo de Horticultura*.
- Tsenkova, R., Atanassova, S., Toyoda, K., Ozaki, Y., Itoh, K., & Fearn, T. (1999). Near-infrared spectroscopy for dairy management: Measurement of unhomogenized milk composition. *Journal of Dairy Science*, 82(11), 2344–2351. [https://doi.org/10.3168/jds.S0022-0302\(99\)75484-6](https://doi.org/10.3168/jds.S0022-0302(99)75484-6)
- Vandeginste, B. G. M., Massart, D. L., Buydens, L. M. C., De Jong, S., Lewi, P. J., & Smeyers-Verbeke, J. (1998). *Handbook of chemometrics and qualimetrics: Part B* (Elsevier (Ed.)).

- Vásquez-Villalobos, V., & Lescano, C. (2010). Predicción por redes neuronales artificiales de la calidad fisicoquímica de vinagre de melaza de caña por efecto de tiempo-temperatura de alimentación a evaporador-destilador flash. *Scientia Agropecuaria*, 1(1), 63–73. <https://doi.org/10.17268/sci.agropecu.2010.01.06>
- Vega Huerta, H. F. (2017). Visión artificial para reconocimiento de mangos exportables utilizando redes neuronales. *Paideia*, 4(5), 38–45. <https://doi.org/10.31381/paideia.v4i5.906>
- Verdini, R. A., Zorrilla, S. E., Rubiolo, A. C., & Nakai, S. (2007). Multivariate statistical methods for Port Salut Argentino cheese analysis based on ripening time, storage conditions, and sampling sites. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 86(1), 60–67. <https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/j.chemolab.2006.08.006>
- Vicente Hinestroza, L. A., Morales Toledo, L., Moreno Martínez, V. A., & Pérez Reséndiz, J. A. (2014). *Anarmonicidad y Resonancia en Vibraciones de Moléculas* (p. 24). Departamento de Física y Química Teórica.
- Visconti, L. G., Rodríguez, M. S., & Di Anibal, C. V. (2020). Determination of grated hard cheeses adulteration by near infrared spectroscopy (NIR) and multivariate analysis. *International Dairy Journal*, 104, 104647. <https://doi.org/10.1016/j.idairyj.2020.104647>
- Vivar-Quintana, A. M., González-Martín, M. I., Revilla, I., & Betances-Salcedo, E. V. (2018). Determination and quantification of phenolic acids in raw propolis by reversed phase high performance liquid chromatography. Feasibility study for the use of near infrared spectroscopy. *Journal of Apicultural Research*, 57(5), 648–656. <https://doi.org/10.1080/00218839.2018.1494915>
- Wang, H., Peng, J., Xie, C., Bao, Y., & He, Y. (2015). Fruit Quality Evaluation Using Spectroscopy Technology: A Review. *Sensors*, 15(5), 11889–11927. <https://doi.org/10.3390/s150511889>
- Wang, L., Sun, D. W., Pu, H., & Cheng, J. H. (2017). Quality analysis, classification, and authentication of liquid foods by near-infrared spectroscopy: A review of recent research developments. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, 57(7), 1524–1538. <https://doi.org/10.1080/10408398.2015.1115954>
- Williams, P. C., & Sobering, D. C. (1993). Comparison of commercial near infrared transmittance and reflectance instruments for analysis of whole grains and seeds. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 1(1), 25–32. <https://doi.org/10.1255/jnirs.3>
- WinISI II, v. 1.50. (2000). Infrasoft International, LLC.
- Wold, H. (1975). Soft Modelling by Latent Variables: the Nonlinear Partial Least Squares Approach. In *Perspectives in Probability and Statistics, Papers in Honour of MS Bartlett, J. Gani, ed.* Academic Press.
- Yu, P., Low, M. Y., & Zhou, W. (2018). Development of a partial least squares-artificial neural network (PLS-ANN) hybrid model for the prediction of consumer liking scores of ready-to-drink green tea beverages. *Food Research International*, 103, 68–75. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2017.10.015>
- Yu, P., Low, M. Y., Zhou, W., Yang, Y., Wu, X. T., Yang, J. L., Gao, W., & Pei, Z. (2014). Design of experiments and regression modelling in food flavour and sensory analysis: A review. *Zhongguo Guanxing Jishu Xuebao/Journal of Chinese Inertial Technology*, 22(2), 191–194. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2017.11.013>

-
- Zareef, M., Chen, Q., Hassan, M. M., Arslan, M., Hashim, M. M., Ahmad, W., Kutsanedzie, F. Y. H., & Agyekum, A. A. (2020). An Overview on the Applications of Typical Non-linear Algorithms Coupled With NIR Spectroscopy in Food Analysis. In *Food Engineering Reviews* (Vol. 12, Issue 2, pp. 173–190). Springer. <https://doi.org/10.1007/s12393-020-09210-7>
- Zeppa, G., Giordano, M., Bertolino, M., & Gerbi, V. (2005). Application of artificial neural network on mono- and sesquiterpenes compounds determined by headspace solid-phase microextraction–gas chromatography–mass spectrometry for the Piedmont ricotta cheese traceability. *27th International Symposium on Capillary Chromatography RIVA 2004*, 1071(1–2), 247–253. <https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/j.chroma.2004.11.083>
- Zhu, M. Z., Wen, B., Wu, H., Li, J., Lin, H., Li, Q., Li, Y., Huang, J., & Liu, Z. (2019). The Quality Control of Tea by Near-Infrared Reflectance (NIR) Spectroscopy and Chemometrics. In *Journal of Spectroscopy* (Vol. 2019). Hindawi Limited. <https://doi.org/10.1155/2019/8129648>

