

VERIFICACIÓN DEL CONTENIDO DE HARINA INTEGRAL EN PAN UTILIZANDO TÉCNICAS BASADAS EN IMÁGENES HIPERESPECTRALES (HSI) Y UN MÉTODO DE CUANTIFICACIÓN BASADO EN EL RECUENTO DE PÍXELES PREVIAMENTE CLASIFICADOS

Miriam Medina-García¹, Esteban A. Roca-Nasser¹, Miguel A. Martínez-Domingo², Eva M. Valero², Alejandra Arroyo-Cerezo¹, Ana M. Jiménez-Carvelo¹

¹Departamento de Química Analítica, Universidad de Granada, Av. Fuentenueva S/N, 18071, Granada, España

²Departamento de Óptica, Universidad de Granada, Av. Fuentenueva S/N, 18071, Granada, España
miriammedina@ugr.es

Abstract

Los productos alimenticios integrales han experimentado una creciente demanda en el mercado, fruto de sus numerosos beneficios para la salud humana. Entre ellos, destaca el pan integral siendo uno de los productos más consumidos. Por este motivo, se hace imperativo establecer controles de calidad para este producto, con el fin de proteger al consumidor de posibles fraudes alimentarios. En esta línea, el estudio presentado desarrolló un método analítico rápido y respetuoso con el medio ambiente que permitió evaluar el contenido de harina integral en pan, convirtiéndose así, en la única solución analítica hasta el momento, que permite evaluar la calidad de este producto tras la etapa de producción del mismo. Dicho método está basado en la aplicación de técnicas basadas en imágenes hiperespectrales (HSI), junto con herramientas quimiométricas. Además, se desarrolló la—metodología innovadora denominada "cuantificación basada en el recuento de píxeles previamente clasificados" (QPC) Los resultados del método permitieron predecir el porcentaje de harina integral en 48 panes con una desviación máxima de un 8% del valor estimado.

1. Introducción

En los últimos años, el interés de los consumidores por adquirir productos alimenticios elaborados con harina integral ha experimentado un notable incremento. Este fenómeno se atribuye a una mayor toma de consciencia entre la población acerca de los beneficios asociados a una dieta saludable [1].

La harina integral conserva todos los componentes del grano del cereal con el que se ha elaborado, incluyendo el endospermo, germen y salvado. Esto la convierte en una fuente rica de nutrientes, vitaminas, fibra, minerales y antioxidantes. Estas características beneficiosas para la salud humana, han impulsado la demanda en el mercado de productos alimenticios elaborados con este tipo de harina, siendo el pan integral el más consumido [2-4] Este hecho subraya la necesidad de establecer normativas que regulen la composición de dichos productos así como, de

implementar controles que garanticen la calidad y seguridad de los mismos con el fin de proteger al consumidor de posibles fraudes alimentarios y garantizar su salud y seguridad.

Hasta la fecha, no existe ninguna normativa oficial europea que regule el etiquetado y contenido de harina integral en pan. En este caso particular, cada estado miembro tiene su propia normativa [5,6]. Esto no solo afecta a la confianza del consumidor, sino que, además, dificulta la tarea de garantizar la calidad del producto, puede dar lugar a una falta de transparencia y a una competencia desleal entre productores. A este hecho se le suma la inexistencia de un método de control que permita evaluar si este producto cumple con los estándares de calidad y seguridad alimentaria tras su etapa de producción.

A pesar de existir un amplio número de estudios publicados cuyo objetivo fue evaluar la calidad y seguridad del pan, no existía hasta el momento, un método que permitiera verificar su contenido de harina integral [7-10]. Con el fin de abordar dicha problemática, el presente estudio propuso desarrollar un método analítico aplicando técnicas basadas en imágenes hiperespectrales (HSI), en combinación con métodos avanzados de análisis de datos, como son las herramientas quimiométricas, para la autenticación del contenido de harina integral en pan.

HSI es una técnica rápida, no-destruktiva/no-invasiva y respetuosa con el medio ambiente. Esta técnica permite obtener información espacial y espectral de la muestra de forma simultánea, almacenando dicha información en una estructura tridimensional de datos, la cual se representa visualmente en forma de imagen. Una imagen se encuentra subdividida en regiones espaciales denominadas píxeles. Cada píxel contiene información espectral de la muestra en ese punto concreto del espacio [11,12].

Una imagen se encuentra definida por un gran volumen de datos, por ese motivo, es imperativo aplicar herramientas propias de la minería de datos (quimiometría) para poder extraer y analizar la información contenida. Estas herramientas permiten reducir el tamaño del set de datos, eliminar ruidos, interferencias, etc. [13]. Tras completar esta etapa, conocida como pre-procesado de datos, se

obtiene una imagen pre-tratada que contiene tantas huellas espectrales características e identificativas de la muestra como píxeles la conformen. Dichas huellas espectrales pueden analizarse empleando métodos de análisis multivariable como son el análisis de componentes principales (PCA), la regresión parcial por mínimos cuadrados (PLS), el análisis discriminante mediante regresión parcial por mínimos cuadrados (PLS-DA) o el sistema de aprendizaje automático mediante vectores soporte (SVM). Dichos métodos han sido ampliamente aplicados en combinación con HSI para llevar a cabo estudios cualitativos y cuantitativos en el ámbito del control de calidad de alimentos [14-16].

El estudio presentado en este artículo empleó métodos de análisis multivariable junto con una metodología *ad-hoc* de análisis de datos innovadora denominada "cuantificación basada en recuento de píxeles previamente clasificados" (QPC, del inglés, *quantification based on pixel counting by classification*). QPC parte de la siguiente hipótesis: "Una imagen hiperespectral capturada de un pan que se ha elaborado con un único tipo de harina (integral o blanca) presenta píxeles espectralmente homogéneos, mientras que en el caso contrario (mezcla de harina integral y blanca), presenta píxeles espectralmente heterogéneos". Esto está relacionado directamente con el proceso de elaboración de cada tipo de harina. La harina blanca se elabora moliendo únicamente el germen del grano. Como resultado se obtiene una matriz homogénea. Sin embargo, la harina integral se obtiene moliendo todas las partes del grano. Como resultado de la molienda del endospermo y el salvado, se obtienen partículas discernibles y uniformemente dispersas por toda la matriz, dotándola de un carácter homogéneo, aunque químicamente distinto al de la harina blanca. Cuando se mezclan ambas harinas, las partículas citadas no se encuentran dispersas de forma uniforme (ver Fig. 1). Dichas partículas pueden ser detectadas mediante HSI y cuantificadas utilizando herramientas quimiométricas para estimar su contenido. Bajo esta premisa se desarrolló el presente estudio.

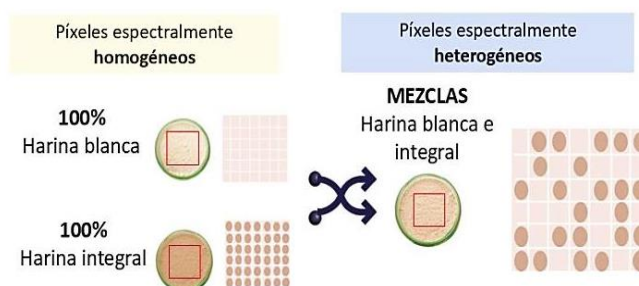


Fig. 1. Representación de los píxeles que constituyen imágenes hiperespectrales capturadas de panes elaborados con distintos tipos de harina (blanca, integral y mezcla de ambas).

El estudio presentado en este artículo fue expuesto en el congreso internacional "Association for Spectral Imaging-2024 (IASIM-2024)", y forma parte del trabajo publicado por Medina-García, M., et al 2024 [17]. IASIM-2024 es un congreso internacional orientado al intercambio de información e ideas dentro de la comunidad general de la imagen espectral, independientemente del intervalo espectral o espacial de trabajo, o el área de aplicación, definiéndose como un foro unificado, abierto, interdisciplinar e interactivo.

2. Materiales y métodos

2.1. Muestras de pan

Se elaboraron un total de 159 muestras de pan de las cuales, 59 se elaboraron únicamente con harina blanca, 52 únicamente con harina integral y 46 utilizando diferentes proporciones (10%, 30%, 50%, 70% y 90%) de ambos tipos (porcentajes expresados en g de harina integral/100 g de harina total empleada). Dentro de este conjunto de muestras, 15 de ellas (7 elaboradas únicamente con harina blanca y 8 únicamente con harina integral) se elaboraron en un periodo de tiempo distinto y por un operador diferente con el fin de comprobar la robustez del método analítico.

Se utilizaron dos panificadoras domésticas ((TAURUS, My Bread. Barcelona, España y Cecotec, Bread&Co, Valencia, España) para elaborar el pan. Los ingredientes utilizados fueron agua (180 mL), azúcar (8 g), sal (3 g), harina (300 g), levadura (7 g) y aceite de oliva virgen extra (22 g). Además, se emplearon harinas procedentes de distintos cereales comerciales, incluyendo: trigo, avena, espelta y centeno.

Se eliminó la corteza de cada una de las muestras de pan elaboradas y la miga se sometió a un proceso de secado durante 1h a 105°C utilizando una estufa de secado (JP Selecta, Barcelona, España). Tras este proceso, la miga deshidratada se molió utilizando una batidora de mano, se envasó al vacío en una bolsa de plástico y se almacenó bajo condiciones de congelación (-20°C).

Como paso previo a la etapa de análisis, cada muestra se descongeló y se depositó en una placa Petri de 6 cm de diámetro y 1,5 cm de alto hasta cubrirla.

2.2. Análisis mediante HSI

Se empleó una cámara hiperespectral Resonon Pila-L (Resonon Inc., Integrys, Mississauga, Canada), previamente calibrada, que midió en el intervalo espectral VNIR (400-1000 nm) con un intervalo de 5 nm (121 bandas), en modo reflectancia. Se emplearon 4 lámparas halógenas situadas formando un ángulo de 45° aproximadamente como fuente de iluminación.

El tiempo de captura de cada imagen fue de 4.35 segundos. Cada imagen hiperespectral capturada contenía 8 muestras dispuestas en dos filas y 4 columnas (ver Fig. 2). La posición número 1 de cada captura fue ocupada por una muestra que se mantuvo constante durante todo el proceso de medida como control de calidad (QC), con el fin de asegurar que las condiciones de análisis se mantuvieron constantes.



Fig. 2. Imagen hiperespectral de 8 muestras de pan capturada empleando la cámara Resonon Pika-L.
*QC: Quality Control.

2.3. Procesamiento de los datos

Cada imagen se almacenó como fichero "band interleaved by line" (.bil) y, posteriormente, se transformó a formato MATLAB (.mat). Se empleó el software MATLAB (R2019a version, Mathworks Inc., Natick, MA, USA) para llevar a cabo el procesamiento de datos.

MATLAB Hyperspectral Toolbox fue empleado para visualizar cada imagen y seleccionar las regiones de interés (ROIs). Cada ROI se seleccionó clicando en el centro de cada muestra. De esta forma se obtuvieron 8 ROIs por cada imagen capturada constituidos cada uno por un área de 225 x 225 píxeles. A su vez, cada píxel contenía una huella espectral con 121 bandas espectrales. Como resultado, por cada muestra se obtuvo una estructura 3D de datos de 225×225×121 elementos, sumando un total de 50.625 espectros por muestra. A partir de los 50.625 espectros por muestra se calculó y almacenó por separado su espectro promedio correspondiente.

Con el objetivo de simplificar la etapa de análisis de datos, se llevó a cabo una reducción de los mismos. Esta reducción consistió en la selección de 100 píxeles aleatorios de cada ROI y el almacenamiento de sus espectros correspondientes en forma de matriz. De esta forma, se consiguió transformar la estructura 3D de datos a una estructura 2D de dimensiones 100 x 121 elementos por muestra.

Finalmente, todos los espectros se escalaron aplicando el método de normalización *Standard Normal Variation* (SNV) como preprocesado, con el fin de corregir el desplazamiento de la línea base y las variaciones globales de intensidad entre los espectros, consecuencia de la falta de reproducibilidad intrínseca durante la etapa de captura de imágenes.

Como paso previo a la aplicación de métodos de análisis multivariable se llevó a cabo un análisis de similitud en el que se estudiaron los espectros promedio de la muestra QC de cada imagen capturada. Para ello se utilizó el índice Nearness (NEAR) [18]. Los resultados se encuentran recogidos en el artículo original publicado por Medina-García et al 2024 [17].

2.4. Análisis exploratorio/cribado

Se aplicaron métodos de análisis exploratorio o de cribado, como el PCA y el PLS con el fin de estudiar si existían agrupaciones naturales de los espectros promedio obtenidos de 144 muestras de pan, y si estas podrían estar relacionadas con el tipo de harina con la que se habían elaborado (harina blanca, integral o mezcla de ambas).

2.5. Autenticación del contenido de harina integral en pan: aplicación del método QPC

La metodología QPC desarrollada y empleada por primera vez en este estudio puede resumirse en dos etapas: (i) clasificación y (ii) cuantificación.

2.5.1. Etapa de clasificación: muestras de pan elaboradas con harina integral vs harina blanca

Una vez evaluados los comportamientos de las muestras tras aplicar métodos de análisis exploratorio o de cribado es posible aplicar métodos de clasificación que permitan construir un modelo capaz de discriminar entre muestras que pertenecen a distintas clases previamente definidas. Cada clase se define en función de las características y el comportamiento de las muestras. De esta forma es posible agrupar las muestras en función de sus similitudes o diferencias.

En este estudio se empleó el método de sistema de aprendizaje automático mediante SVM seleccionando una función de base radial (RBF) como *kernel* (función núcleo) y se utilizaron un total de 96 espectros promedio (52 espectros promedio obtenidos a partir de imágenes capturadas de muestras únicamente elaboradas con harina blanca y 44 únicamente con harina integral). Se definieron dos clases de pan: "Integral" y "Blanco".

El modelo de clasificación se entrenó empleando el 70% de las muestras y el 30% restante se utilizó para validarlo. Esta validación se llevó a cabo bajo condiciones de repetibilidad (muestras elaboradas por el mismo operador durante un corto espacio de tiempo). Se aplicó el algoritmo CADEX, es decir, el método Kennard-Stone's, para seleccionar los espectros promedio del set de validación 1. [19].

Adicionalmente, se llevó a cabo una segunda etapa de validación utilizando 15 muestras de pan elaboradas por un operador distinto en un periodo de tiempo posterior (condiciones de reproducibilidad).

2.5.2. Etapa de cuantificación: estimación del porcentaje de harina integral en panes elaborados con distintas proporciones de harina integral y harina blanca.

Una vez entrenado y validado el modelo de clasificación se llevó a cabo la cuantificación de harina integral en panes elaborados con distintas proporciones de harina integral y blanca. Para ello se estudiaron las 48 muestras de pan que habían sido elaboradas con mezcla de ambas harinas.

En esta etapa se utilizó la matriz 2D constituida por 100×121 elementos extraída de las muestras citadas. El modelo de clasificación construido en la etapa anterior permitirá discriminar cada espectro contenido en los 100 píxeles que componen la matriz en "Integral" o "Blanco". De esta forma, se podrá establecer una relación entre la proporción de píxeles clasificados como "Integral" y el porcentaje de harina integral con el que se elaboró la muestra en estudio.

3. Resultados

3.1. Análisis exploratorio/cribado: PCA y PLS

Tras aplicar el método PCA fue posible observar las agrupaciones naturales de los espectros promedio del conjunto formado por 144 muestras de pan. Para ello se representó el gráfico de puntuaciones de la componente principal 1 (PC1) frente a la 2 (PC2) (Fig. 3A). La suma de ambas componentes representa la máxima variabilidad entre las muestras (97.98% de la varianza total acumulada). Los rombos rojos representan el espectro promedio de las muestras elaboradas exclusivamente con harina blanca, los cuadrados verdes aquellas muestras elaboradas únicamente con harina integral y, los triángulos azules las muestras elaboradas con distintas proporciones de ambas. En este gráfico se puede observar como las muestras de pan elaborado con harina blanca muestran una tendencia a localizarse en valores negativos de la PC1, mientras que las muestras elaboradas únicamente con harina integral tienden a localizarse en valores positivos de esta componente. Sin embargo, las muestras elaboradas con mezclas de ambas harinas se sitúan entre ambos valores. Este es un aspecto importante a resaltar ya que nos informa de que, las diferencias entre las muestras están directamente relacionadas con la proporción de harina blanca e integral con la que se ha elaborado.

Con el fin de confirmar la observación anterior, se aplicó el método PLS, como método de cribado, para estudiar el mismo conjunto de muestras. La Fig. 3B muestra el gráfico de puntuaciones de la variable latente 1 (LV1) frente a la 2 (LV2). En conjunto, ambas variables explicaron un 97.94% de la varianza total acumulada. En este caso, se utilizó una

codificación de las muestras en función del porcentaje de harina integral con el que se había elaborado. Como se puede observar, aquellas muestras con un porcentaje de harina integral nulo se localizaron entre los valores más negativos de la LV1. A medida que el porcentaje de harina integral con el que se elaboraron las muestras aumentaba, la tendencia de las mismas se alejaba gradualmente a valores más positivos de la LV1. Tras estas observaciones, se concluyó en construir un método de clasificación con el objetivo de discriminar entre muestras de pan elaboradas únicamente con harina integral o con harina blanca.

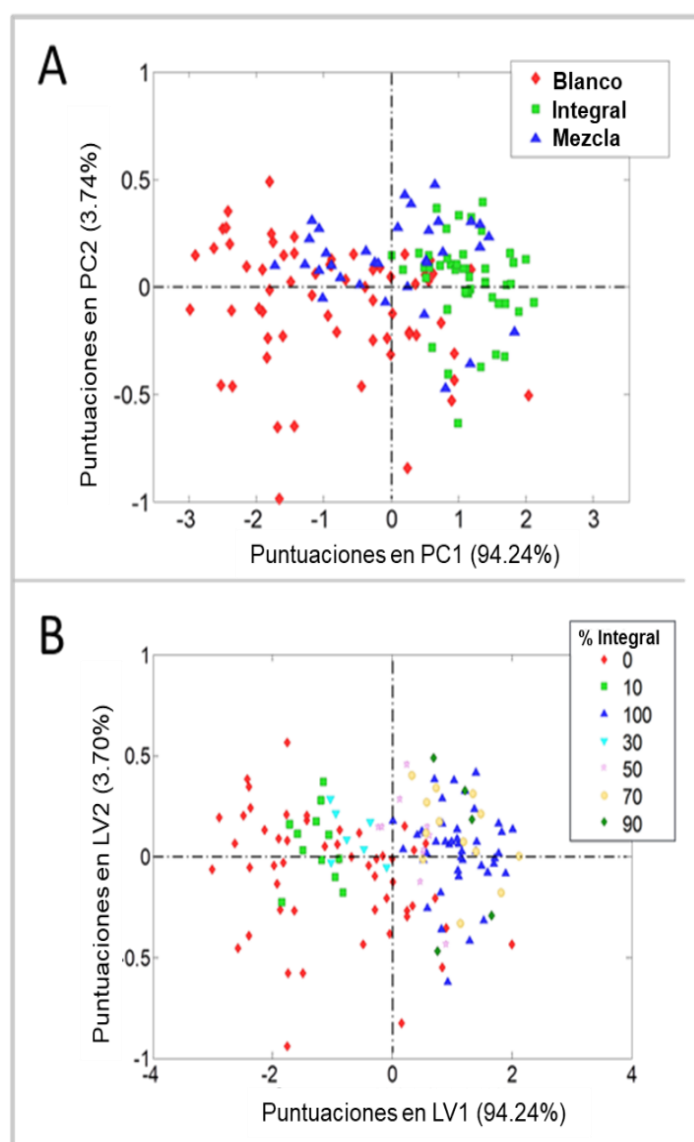


Fig. 3. Gráfico de puntuaciones PCA y PLS obtenido tras analizar el espectro promedio de muestras de pan etiquetadas como "Blanco", "Integral" o "Mezcla" en función del tipo/s de harina empleada en su elaboración.

3.2. Construcción de un modelo de clasificación mediante SVM

Se empleó SVM como método de clasificación no lineal para construir un modelo capaz de discriminar entre panes elaborados únicamente con un tipo de harina, definiendo dos clases: "Integral" (clase objetivo) o "Blanco" (clase alternativa). La Fig. 4 muestra los resultados de clasificación obtenidos tras la segunda validación llevada a cabo empleando 15 muestras de pan elaboradas bajo condiciones de reproducibilidad (ver apartado 2.5.1.). La línea morada muestra el valor umbral establecido para separar las muestras clasificadas como "Integral" y las clasificadas como "Blanco". Tal y como se aprecia en el gráfico, solo 3 muestras de pan fueron clasificadas de manera incorrecta. En términos generales, el modelo mostró errores por debajo del 20%.



Fig. 4. Gráfico de clasificación obtenido tras realizar la segunda validación del modelo desarrollado aplicando SVM considerando dos clases: "Integral" y "Blanco".

3.3. Cuantificación del contenido de harina integral en panes elaborados con distintas proporciones de harina integral y harina blanca.

Una vez entrenado y validado el modelo de clasificación desarrollado aplicando SVM, este se utilizó para llevar a cabo la segunda etapa de la metodología QPC.

El modelo permitió determinar el porcentaje de harina integral con el que se elaboraron 48 muestras analizando píxel a píxel la imagen capturada de las mismas. Cada píxel se clasificó como "Integral" o "Blanco".

La Fig. 5 muestra un ejemplo de la aplicación del modelo desarrollado para estimar el porcentaje de harina integral de una muestra que se elaboró con un 70% de dicha harina. En este caso, un total de 76 píxeles fueron clasificados como "Integral". Esto indicaría que el contenido en harina integral de la muestra es de un 76% (porcentaje expresado en gramos de harina integral/gramos totales de harina empleada en su elaboración). Este proceso se repitió con cada una de las 48 muestras de pan.

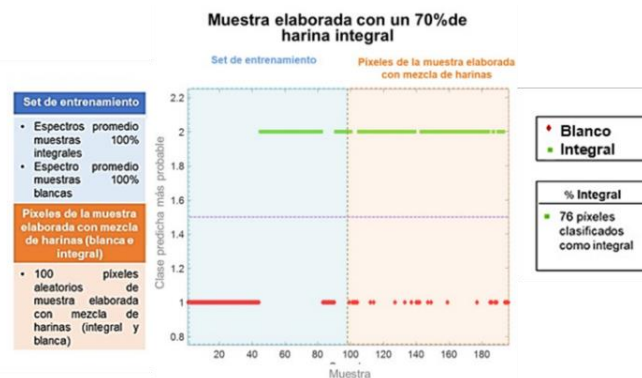


Fig. 5. Aplicación de la metodología QPC para cuantificar el contenido de harina integral en un pan elaborado con un 70% de dicha harina (porcentaje expresado en gramos de harina integral/ gramos totales de harina empleada en la elaboración).

Para evaluar la capacidad de predicción del modelo se evaluaron y contrastaron los resultados comparando el porcentaje de harina estimado por el modelo, con el porcentaje de harina real empleado en la elaboración de cada muestra.

Como resultado se obtuvo un modelo de clasificación capaz de predecir el porcentaje de harina integral en panes con un error inferior al 8%.

4. Conclusiones

El estudio presentado en el congreso IASIM-2024 permitió desarrollar una solución analítica rápida y respetuosa con el medio ambiente capaz de verificar el contenido de harina integral en pan, utilizando técnicas HSI en combinación con herramientas quimiométricas. Además, este estudio desarrolló y aplicó por primera vez una metodología de cuantificación denominada QPC. Este método fue capaz de predecir el porcentaje de harina integral en pan con un error máximo del 8% sobre el valor real, independientemente del tipo de cereal empleado para la elaboración de la harina (trigo, avena, espelta y centeno), convirtiéndose así, en una herramienta de alto potencial para paliar la actual ausencia de metodologías de control de calidad en la postproducción del pan.

Agradecimientos

MMG agradece a la Sociedad Española de Química Analítica (SEQA) por la beca otorgada que permitió exponer el estudio presentado en este artículo en el congreso internacional IASIM-2024. AMJC agradece la ayuda (RYC2021-031993-I) financiada por MCIN/AEI/501100011033 y por "European Union NextGeneration EU/PRTR". AAC agradece al Ministerio de Universidades la beca pre-doctoral FPU (FPU20/04711, Formación del Profesorado Universitario).

Referencias

- [1] D.C. Petrescu, I. Vermeir, R.M., Petrescu-Mag, Consumer understanding of food quality, healthiness, and environmental impact: a cross-national perspective. *Int. J. Environ. Res. Public Health*. 17 (2020) 169. <https://doi.org/10.3390/ijerph17010169>
- [2] W.P. Edwards, Introduction, *The Science of Bakery Products*. (2007), 1–10. <https://doi.org/10.1039/9781847557797>
- [3] A.F. Doblado-Maldonado, O.A. Pike, Key issues and challenges in whole wheat flour milling and storage. *Journal of Cereal Science*. 56 (2016) 119-126. <https://doi.org/10.1016/j.jcs.2012.02.015>
- [4] S. Ma, Z. Wang, X. Guo, F. Wang, J. Huang, B. Sun, X. Wang, Sourdough improves the quality of whole-wheat flour products: mechanisms and challenges a review. *Food Chemistry*. 360 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.130038>
- [5] Health Promotion Knowledge Gateway, 2022. Whole Grain. Knowledge for policy. Retrieved from https://knowledge4policy.ec.europa.eu/health-promotion-knowledge-gateway/whole-grain_en (Acceso en diciembre de 2024).
- [6] Real Decreto 308/2019, de 26 de abril, por el que se aprueba la norma de calidad para el pan. *BOE* 2019, 113, 50168-50175.
- [7] J.M. Amigo, A. Del Olmo, M.M. Engelsen, H. Lundkvist, S.B. Engelsen, Staling of white wheat bread crumb and effect of maltogenic α -amylases. Part 3: Spatial evolution of bread staling with time by near infrared hyperspectral imaging. *Food Chemistry*. 353 (2021) 129478. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.129478>
- [8] S.J. Olakanmi, D.S. Jayas, J. Paliwal, M.M.A. Chaudhry, C.R.J., FindlayQuality characterization of fava bean-fortified bread using hyperspectral Imaging. *Foods*. 13 (2024) 231. <https://doi.org/10.3390/foods13020231>
- [9] S. Verdú, F. Vásquez, R. Grau, E. Ivorra, A. J. Sánchez, J.M. Barat, Detection of adulterations with different grains in wheat products based on the hyperspectral image technique: The specific cases of flour and bread. *Food Control*. 62 (2016) 373–380. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2015.11.002>
- [10] E.S. de Almeida Duarte, V.E. de Almeida, G.B. da Costa, M.C.U. de Araújo, G. Véras, P.H.G.D. Diniz, D.D. de Sousa Fernandes, Feasibility study on quantification and authentication of the cassava starch content in wheat flour for bread-making using NIR spectroscopy and digital images. *Food Chemistry*. 368 (2022) 130843. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.130843>
- [11] J.M. Amigo, S. Grassi, Configuration of hyperspectral and multispectral imaging systems. *Hyperspectral Imaging. Data Handling in Science and Technology*. 32 (2019) 17-34. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63977-6.00002-X>
- [12] H. Huang, L. Liu, M.O. Ngadi, Recent Developments in Hyperspectral Imaging for Assessment of Food Quality and Safety Sensors. *Sensors*. 14 (2014) 7248-7276. <https://doi.org/10.3390/s140407248>
- [13] D. Saha, A. Manickavasagan, Machine learning techniques for analysis of hyperspectral images to determine quality of food products: A review. *CRFS*. 4 (2021) 28-44. <https://doi.org/10.1016/j.crfs.2021.01.002>
- [13] N.C. Basantia, L.M. Nollet, M. Kamruzzaman (Eds.). *Hyperspectral Imaging Analysis and Applications for Food Quality. Data extraction and treatment*, 2018, pp 45-56. CRC Press. <https://doi.org/10.1201/9781315209203>
- [14] Sampaio, P.S., Castanho, A., Almeida, A.S., Oliveira, J., & Brites, C. Identification of rice flour types with near-infrared spectroscopy associated with PLS-DA and SVM methods. *Eur Food Res Technol*. 246 (2020) 527-537. <https://doi.org/10.1007/s00217-019-03419-5>
- [15] Li, F.L., Xie, J., Wang, S., Wang, Y., & Xu, C.H. Direct qualitative and quantitative determination methodology for massive screening of DON in wheat flour based on multi-molecular infrared spectroscopy (MM-IR) with 2T-2DCOS. *Talanta*. 234 (2021) 122653. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2021.122653>
- [16] S. Sarkar, J.K. Basak, B.E. Moon, H.T. Kim, A comparative study of PLSR and SVM-R with various preprocessing techniques for the quantitative determination of soluble solids content of hardy kiwi fruit by a portable vis/NIR spectrometer. *Foods*. 9, (2020) 1078. <https://doi.org/10.3390/foods9081078>
- [17] M. Medina-García, E.A. Roca-Nasser, M.A. Martínez-Domingo, E.M. Valero, A. Arroyo-Cerezo, L. Cuadros-Rodríguez, A.M. Jiménez-Carvelo, Towards the establishment of a green and sustainable analytical methodology for hyperspectral imaging-based authentication of wholemeal bread. *Food Control*. 166 (2024) 110715. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2024.110715>
- [18] A. Arroyo-Cerezo, M. Medina-García, L. Cuadros-Rodríguez, D.N. Rutledge, A.M. Jiménez-Carvelo, Chemometric enhancement for blind signal resolution from non-invasive spatially offset Raman spectra. *Chemom. Intell. Lab. Syst*. 243 (2023) 105027. <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2023.105027>
- [19] Kennard, R. W., & Stone, L. A.. Computer aided design of experiments. *Technometrics*. 11 (1969) 137-148. <https://doi.org/10.2307/1266770>