

ESTIMACIÓN DEL GRADO DE TOSTIÓN DE CAFÉ MOLIDO USANDO
HUELLAS ESPECTRALES (VIS-NIR) Y ALGORITMOS DE MACHINE
LEARNING.



LUIS GERARDO GUTIÉRREZ VILLADA

CORPORACIÓN UNIVERSITARIA COMFACAUCA - UNICOMFACAUCA
FACULTAD DE INGENIERÍAS
INGENIERÍA MECATRÓNICA
POPAYÁN, CAUCA
2021

ESTIMACIÓN DEL GRADO DE TOSTIÓN DE CAFÉ MOLIDO USANDO
HUELLAS ESPECTRALES (VIS-NIR) Y ALGORITMOS DE MACHINE
LEARNING.

LUIS GERARDO GUTIÉRREZ VILLADA

TRABAJO DE GRADO PARA OPTAR AL TÍTULO DE:
INGENIERO MECATRÓNICO

DIRECTOR:
M.Sc. DAVID ARMANDO REVELO LUNA

CORPORACIÓN UNIVERSITARIA COMFACAUCA - UNICOMFACAUCA
FACULTAD DE INGENIERÍAS
INGENIERÍA MECATRÓNICA
POPAYÁN, CAUCA
2021

NOTA DE ACEPTACIÓN

FIRMA DEL DIRECTOR OPCIÓN DE GRADO

FIRMA DEL JURADO

FIRMA DEL JURADO

DEDICATORIA

El presente trabajo de investigación lo dedico principalmente a mis padres, esposa, y hermanas, a mis padres por haber sentado en mis bases de responsabilidad, honestidad y deseos de superación, queriendo reflejar de ellos siempre sus virtudes infinitas, a mi esposa por su apoyo incondicional en los momentos más difíciles de este camino, y mis hermanas por siempre estar para darme una voz de aliento.

A Dios por haberme dado la vida y darme la oportunidad de conseguir un logro tan importante en mi vida profesional.

A todas las personas que me apoyaron y que hicieron posible que este trabajo se llevara a cabo exitosamente, en especial a los que me brindaron sus conocimientos.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a mis padres Cristóbal Gutiérrez y Nora Villada, y a mi esposa Leidy Rengifo por su gran apoyo día a día, ayudándome a cumplir una meta más en la vida, por creer siempre en mí y darme el soporte para seguir cada día adelante.

Agradezco al personal docente de la corporación universitaria Comfacauca del programa de ingeniería mecatrónica, por haberme brindado sus conocimientos, especialmente al Ingeniero David Armando Revelo Luna, quien confió en mí, y con su dirección, conocimiento, colaboración, y constante enseñanza, me dio las herramientas suficientes para sacar hacia adelante este trabajo.

CONTENIDO

DEDICATORIA	4
resumen.....	10
INTRODUCCIÓN	11
1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA Y JUSTIFICACIÓN	13
OBJETIVOS.....	16
Objetivo general	16
Objetivos específicos	16
2 MARCO DE TEORICO	17
2.1 Tostión de café	17
2.2 Protocolo Agron Gourmet Scale	18
2.3 Teorías de color.....	18
2.4 Colorímetro	18
2.5 Espectrómetro óptico.....	19
2.6 Espacios de color	20
2.6.1 Espacio de color CIE.....	20
2.6.2 Espacio de color RGB.....	21
2.7 Espectroscopia de infrarrojo cercano (NIR).....	22
2.8 Reflectancia espectral.....	23
2.9 Filtro de Savitzky-Golay	23
2.10 Corrección de dispersión multiplicativa (MSC)	24
2.10 sistemas de clasificación	24
2.10.1 Redes neuronales artificiales	24
2.10.2 Árboles de clasificación.....	25
2.10.3 Bosques aleatorios (Random Forest)	25
2.10.4 Máquinas de soporte vectorial (SVM)	26
2.10.5 Auto-sklearn.....	26
2.11 puesta en produccion de modelos de machine learning.....	27
3 ESTADO DEL ARTE	28
4 METODOLOGIA.....	31
4.1 variables de respuesta.....	32
4.2 materiales	32
4.2.1 Colorímetro digital QUANTIK IR-800.....	32

4.2.2	Espectrómetro Ocean Optics STS-VIS	33
4.2.3	Sonda de reflexión VIS-NIR	34
4.2.4	Panel de reflectancia de calibración.....	35
4.3	Herramientas informáticas	35
4.4	Articulación del sistema de captura	36
4.5	preparación de la muestra	36
4.6	sistema de clasificación	37
4.6.1	Base de datos	37
4.6.2	Dataset.....	37
4.6.3	Implementación de los sistemas de clasificación	38
4.7	metricas de desempeño.....	39
5	resultados y discusión	41
5.1	sistema de captura	41
5.2	toma de datos con colorímetro ir 800.....	42
5.3	preprocesaMIENTO	44
5.4	Formación de la base de datos.....	45
5.5	modelos de clasificación	46
5.5.1	Redes Neuronales.....	46
5.5.2	Random forest.....	48
5.5.3	Máquinas de soporte vectorial (SVM)	49
5.5.4	Auto-sklearn 120 minutos.....	51
5.5.5	Auto-sklearn 300 minutos.....	53
5.5.6	Máquinas de soporte vectorial con sintonización fina	54
5.5.7	Comparación de los modelos.....	56
5.6	PUESTA EN PRODUCCIÓN en servidor local	58
	conclusiones	60
	trabajos futuros	61
	Referencias.....	62

Figura 1. Proceso de tostado de café. Fuente (Swisscontact, 2016).....	17
Figura 2. Escala Agtron. Fuente (Swisscontact, 2016)	18
Figura 3. Funcionamiento básico del colorímetro. Fuente (Azam , 2020).....	19
Figura 4. Colorímetro CR-410HS-C. Fuente (aquateknica, 2020)	19
Figura 5. Funcionamiento de un espectrómetro. Fuente (Santos P. , 2009).....	20
Figura 6. Espacio de color CIELAB. (Montesinos, 2003)	21
Figura 7. Cubo de color RGB. Fuente (Chernov, Alander, & Bochko, 2015)	22
Figura 8. Diagrama de medición de la huella espectral de café tostado. Fuente autor	31
Figura 9. colorímetro digital QUANTIK IR-800. Fuente autor.....	32
Figura 10. Ocean Optics STS-VIS. Fuente (oceaninsight, 2021).....	33
Figura 11. sonda de reflexión VIS-NIR. Fuente autor	34
Figura 12. Panel de reflectancia calibrado (CRP). Fuente autor.....	35
Figura 13. Sistema físico acoplado. Fuente autor.....	36
Figura 14. Caja de nivelación. Fuente autor	37
Figura 15. Dataset. Fuente autor	38
Figura 16. Diseño en SolidWorks de la caja. Fuente autor	41
Figura 17. Sistema de captura. Fuente autor.....	41
Figura 18. Muestras de café clasificado por grado de tosti3n. Fuente autor.....	42
Figura 19. Toma de muestras con colorímetro IR-800. Fuente autor	42
Figura 20. Diagramas de caja y alambre datos colorímetro IR-800. Fuente autor.....	43
Figura 21. Pre-procesado con ParLeS 3.1. Fuente autor	44
Figura 22. Uni3n de espectros en un solo archivo. Fuente autor.....	45
Figura 23. Espectros de cada grado de tosti3n. Fuente autor	45
Figura 24. Matriz de confusi3n para redes neuronales. Fuente autor.....	47
Figura 25. Matriz de confusi3n para Random forest. Fuente autor.....	49
Figura 26. Matriz de confusi3n para SVM. Fuente autor.....	50
Figura 27. Matriz de confusi3n para Auto-sklearn 120 minutos. Fuente autor.....	52
Figura 28. Matriz de confusi3n para Auto-sklearn 300 minutos. Fuente autor.....	54
Figura 29. Matriz de confusi3n para SVM con sintonizaci3n fina. Fuente autor	55
Figura 30. interfaz con Streamlit. Fuente autor	58

Tabla 1. Principales investigaciones del uso de técnicas ópticas para la determinación del color del café tostado. Fuente autor	30
Tabla 2. Variables de respuesta. Fuente autor	32
Tabla 3. Equivalencia colorímetro IR-800 QUANTIK y escala Agtron. (Jimenez , Correa, & Diezma, 2011).	33
Tabla 4. Características Ocean Optics STS-VIS. Fuente (oceaninsight, 2021).	34
Tabla 5. Sistemas de clasificación implementados. Fuente(autor)	38
Tabla 6. Matriz de confusión para una clasificación binaria. Fuente (Torres, 2020)	39
Tabla 7. Estadístico datos tomados con colorímetro IR-800. Fuente autor	43
Tabla 8. Métricas de modelo de redes neuronales. Fuente autor	47
Tabla 9. Métricas de modelo de Random forest. Fuente autor.	48
Tabla 10. Métricas de modelo SVM. Fuente autor.....	50
Tabla 11. Métricas de modelo Auto-sklearn 120 minutos. Fuente autor.	51
Tabla 12. Métricas de modelo Auto-sklearn 300 minutos. Fuente autor.	53
Tabla 13. Métricas de modelo SVM con sintonización fina. Fuente autor.....	55
Tabla 14. Comparación de modelos implementados. Fuente autor.....	56
Tabla 15. Desempeño individual de cada grado de tosti3n. Fuente autor.	57

RESUMEN

El café es uno de los pilares principales de la economía colombiana, y Colombia es el mayor productor de café de calidad del mundo, pues cuenta con varias regiones con una oferta ambiental especial, como el departamento del Cauca que gracias a estas condiciones ambientales tiene un gran potencial para producir cafés de alta calidad. La creciente demanda mundial de café especial aumenta la necesidad de mejorar los métodos de evaluación de la calidad del café, donde el grado de tuestión determinado por el color de los granos es importante para esta evaluación, pues determina las características de sabor del café. Una de las formas más comunes de determinar el color de café es el uso de colorímetros y cámaras RGB, estos dispositivos están diseñados para trabajar en un rango visible del espectro desde los 400 nm a los 700 nm, obviando una parte muy importante del espectro como el infrarrojo cercano. En el proyecto que aquí se presenta, se desarrolló una herramienta tecnológica, que permite clasificar el café tostado en cinco grados de tuestión (*ligero, medio-ligero, medio, medio-alto y oscuro*) usando técnicas ópticas espectrales. Para esto se usó un espectrómetro óptico, Ocean Optics STS-VIS, operando en un rango entre 350 nm – 800 nm. Así, se usaron muestras de café tostado de 50g, tomando 300 espectros por cada grado de tuestión para un total de 1500 espectros, con los cuales se realizó el entrenamiento y test de once sistemas de clasificación basados en machine learning. Entre estos, cinco usaron los datos con preprocesamiento a los cuales se les aplicó el filtro Savitzky-Golay y corrección de dispersión multiplicativa (MSC); los seis restantes operaron con los datos crudos, donde se obtuvieron resultados de Accuracy entre 0.71 y 0.96. El grado de tuestión medio-alto fue el que mejor desempeño tuvo en 8 de los once sistemas de clasificación. Los sistemas de clasificación entrenados con datos crudos fueron los de mejor rendimiento, de estos se determinó el sistema de clasificación con mayor Accuracy (Accuracy=0.96), el cual fue un modelo de máquinas de soporte vectorial (SVM) con sintonización fina y fue elegido como modelo final. El modelo SVM con sintonización fina fue puesto en producción en servidor local, permitiendo al usuario cargar una huella espectral de datos crudos y obtener la predicción más probable del grado de tuestión. Los resultados mostraron que las huellas espectrales son útiles para determinar el grado de tuestión del café, mediante técnicas de Machine Learning.

INTRODUCCIÓN

El café es uno de los principales *commodities* en el ámbito mundial; de la producción total más del 80% se destina a comercio internacional, tal como lo indica la Organización Internacional del Café (OIC, 2015). El comercio mundial de café es importante para los países exportadores e importadores pues genera altos ingresos, como en el año 2013 que generó ingresos de alrededor de USD 17,9 miles de millones para los países productores. Se consumen alrededor de 600 mil millones de tazas de café en el mundo (Ocampo & Álvarez, 2017). Como lo afirman Quintero & Rosales (2014) *“el café verde, reviste importancia debido a que la producción y el comercio de estos bienes constituyen el pilar de las economías, de la mayoría de países subdesarrollados, principalmente en términos de empleo y de ingresos por exportación”*.

El sector cafetero en Colombia, ha desempeñado históricamente un papel importante en la economía, pues representa el sustento de aproximadamente 560.000 familias caficultoras, dado que el segmento de mercado del café colombiano pertenece al tipo de cafés arábigos, y Colombia contribuye con aproximadamente el 30% de producción de este tipo de café (Ocampo & Álvarez, 2017). Colombia es el mayor productor de café de calidad y punto de referencia del grano de calidad superior en el mundo (OIC, 2015), siendo las condiciones ambientales, el sistema de gestión y respaldo de calidad, los elementos diferenciadores del café colombiano (Ocampo & Álvarez, 2017).

El departamento del Cauca tiene un gran potencial para producir cafés de alta calidad pues cuenta con una oferta ambiental especial, que, sumada al compromiso y amor por la actividad de más de 85 mil familias cafeteras, se constituye en un aporte esencial para la industria cafetera nacional. Por tal motivo, desde 2008 se han consolidado en el departamento programas de Cafés Especiales como Café Nespresso AAA y Rainforest Alliance que han llevado a los caficultores a adquirir conocimientos más específicos sobre la comercialización y trato para un mejor producto final (Comité de Cafeteros del Cauca, 2014).

La creciente demanda mundial de café especial aumenta la necesidad de mejorar los métodos de evaluación de la calidad del café (Tolessa, Rademaker, De Baets, & Boeckx, 2016), donde el grado de tuestión es importante para esta evaluación pues determina las características de sabor del café tostado (Porrás, Vargas, Araúz, & Abarca, 2019). El café molido puede estar disponible en el mercado en diferentes grados de tuestión, que varía de muy claro a muy oscuro, según las preferencias del consumidor. En algunos lugares de Europa, se prefiere el café tostado oscuro, mientras que los tostados medios se prefieren en el Reino Unido y los Estados Unidos. En Turquía, los tostados medios son tradicionales (Nakilcioğlu & Ötleş, 2019)

En esta investigación, se estudiará a escala de laboratorio, el nivel de tuestión para el grano de café molido clasificado en cinco grados (ligero, medio-ligero, medio,

medio-alto y oscuro) empleando algoritmos de clasificación basados en Machine Learning, a través de reflectancia espectral medida en muestras de café de 50 g con un espectrómetro óptico.

1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA Y JUSTIFICACIÓN

La agro-cadena de café es una de las más importantes de la economía colombiana (Comité de Cafeteros del Cauca, 2014) y es generadora de numerosas empresas tostadoras, dado que los tostadores pueden producir perfiles definidos de taza de acuerdo a los parámetros de tuestión, esto implica que el proceso de tuestión es un paso crítico para obtener una buena calidad en taza (Diaz, Omarza, & Rojano, 2018), siendo el color un parámetro comúnmente usado para establecer el grado de tuestión del café (Jimenez, Diezma, & Correa, UN BUEN CAFÉ: UNA SIMBIOSIS DE COLOR Y SABOR, 2011).

En el proceso de tostado, los granos de café crudo se exponen a temperaturas entre 200 °C y 240 °C durante diferentes tiempos, que van desde 12 a 20 minutos, para obtener las propiedades deseadas de los productos finales. Mientras que el proceso de tostado ligero produce un sabor agrio, herboso y poco desarrollado, el proceso de tostado medio tiende a formar un sabor equilibrado y un aroma similar al sabor cítrico. En contraste, el proceso de tostado oscuro hace que el café sea poco ácido. Además, existen reacciones químicas complejas que producen cambios físico-químicos importantes durante el tostado, como la deshidratación, el pardeamiento no enzimático y la pirólisis (Nakilcioğlu & Ötleş, 2019).

El color de los granos de café puede utilizarse como indicador del grado de tuestión, ya que la intensidad del color está directamente relacionada con la curva de temperatura del tueste, a mayor temperatura más oscuro el grano de café. Por lo tanto, el color de tostado como parámetro de control desempeña un papel crucial en el desarrollo de los atributos organolépticos esenciales (Pizarro, Isabel, Gonzales, & Forina, 2007).

Los criterios comúnmente utilizados para evaluar la calidad de los granos de café después del tostado incluyen mediciones de pérdida de peso, densidad, humedad, color y sabor. Estas variables se han utilizado ampliamente en todo el mundo para evaluar la calidad del café (Alessandrini, Romani, Pinnavaia, & DallaRosa, 2008). Para la clasificación del color del café tostado se considera el sistema de clasificación de café tostado Agtron-SCAA (Agtron-RCCS) que fue desarrollado con ocho discos de color, que van desde "muy claro" a "muy oscuro", por la Asociación Especializada de Café de América (SCAA) (Bolek & Ozdemir, 2017). Los criterios usados para evaluar la calidad física de los granos de café incluyen la presencia de defectos como granos oscuros, granos inmaduros, oscuro parcial del grano, y granos rotos; para evaluar la calidad de café en taza se tienen en cuenta atributos como acidez, sabor y cuerpo. Sin embargo, estos métodos de evaluación son subjetivos, costosos, requieren mucho tiempo para la preparación de la muestra y pueden terminar en sistemas de clasificación deficientes (Tolessa, Rademaker, De Baets, & Boeckx, 2016).

Una alternativa de solución a las limitaciones antes descritas, es el uso de equipos de laboratorio para medir el color relativo, con equipos como el espectrofotómetro Agtron (M-BASIC II). Sin embargo, con esta tecnología se obtienen variaciones de lectura según la posición de la muestra, además son necesarias calibraciones repetidas con discos de referencia (Samid, Alves, Groenner, Meira, & Fonseca, 2019).

Una de las formas más comunes para determinar el color del café es el uso de equipos ópticos como los colorímetros. Estos equipos determinan el color en una región limitada de la muestra 2 cm² que no es representativa en materiales heterogéneos. Además, no permiten determinar el color a temperaturas mayores de 80 °C (Virgen, Herrera, Corona, Arriola, & Guatemala, 2016). Estos dispositivos en su gran mayoría están diseñados para el área cromática RGB (rojo, verde, azul), con una limitación espectral en el rango 400 nm a 700 nm (Walsh, Blasco, Zude, & Sun, 2020).

Los colorímetros capturan la luz en rangos de longitud de onda específicos con el uso de fotodetectores filtrados, por ejemplo, el estándar industrial Minolta CR400 captura información únicamente en bandas espectrales seleccionadas manualmente entre los 420 y 700 nm. Sin embargo, el costo de tales filtros especiales puede aumentar considerablemente el valor total de un instrumento. Los colorímetros tampoco son apropiados para análisis de color complejos como metamerismo (Walsh, Blasco, Zude, & Sun, 2020). Los objetos metaméricos se ven iguales en color bajo una fuente de luz, y diferentes bajo otras fuentes de luz (Choudhury, 2015).

Otra alternativa para la estimación de color la constituye el uso de cámaras digitales RGB. Esta técnica tiene limitaciones debido a su baja resolución espectral y su susceptibilidad ante las variaciones de iluminación. Por ejemplo, Virgen (2016) encontró limitaciones al medir el color de café tostado en el espacio CIE (*International Commission on Illumination*) debido a los bajos niveles de iluminación en las muestras tomadas. La intensidad del color resultó fuertemente afectada por la incidencia de la luz en la muestra.

Hoy en día, la industria cafetera tiene una necesidad creciente de métodos para medir los rasgos de la calidad del café de forma objetiva que permitan desarrollar modelos de calibración robustos y precisos (Suzana, Fernandez, De Souza, Da-Wen, & Yoko, 2014). La espectroscopía de infrarrojo cercano (NIR) se ha convertido en una tecnología ampliamente difundida para el análisis cualitativo y cuantitativo en las industrias química, farmacéutica y agroalimentaria, porque es una técnica rápida, simple y no destructiva que requiere poca preparación de muestras. Las propiedades ópticas y la baja capacidad de absorción de agua en la región NIR hacen que este método espectrométrico sea adecuado para el análisis de muestras que contienen una alta proporción de agua, como los alimentos, para subministrar

datos de color, humedad o densidad en tiempo real (Alessandrini, Romani, Pinnavaia, & DallaRosa, 2008).

Diversos estudios se han realizado para evaluar el color del café mediante técnicas ópticas, algunos de estos estudios se presentan en la sección *Estado del Arte* tabla 1. Santos, et al. (2016) encontraron una correlación evaluando los tres parámetros del espacio de color CIE L*a*b* en un rango de 85 al 94% entre el color de café medido usando un colorímetro de laboratorio y la medida de color obtenido con la técnica espectrométrica. En su estudio, Santos, et al., (2016), mostraron que la región NIR con mejor representación de las propiedades físicas del café tostado como el color, son las comprendidas entre los 1000 y los 1300 nm. También en su estudio Bertonea, et al., (2016), utilizaron rangos seleccionados para recolectar los datos espectrales, donde estos rangos fueron, 1970 a 2242.66 nm, 1820 a 1889.64 nm y 1581 a 1751 nm, excluyendo en ambos estudios una región importante del espectro comprendida entre los 800 y los 1000 nm y descartando también las regiones del espectro visible.

Teniendo en cuenta la problemática antes descrita, las limitaciones de las técnicas convencionales en la medida del color del café tostado, y las limitaciones de las alternativas tecnológicas hasta ahora propuestas, surge la siguiente pregunta de investigación:

¿Cómo desarrollar un sistema de clasificación del grado de tuestión del café a partir de huellas espectrales en el rango de 400-800 nm?

OBJETIVOS

Objetivo general

Desarrollar un sistema de clasificación del grado de tuestión de café usando técnicas ópticas espectrales

Objetivos específicos

- Determinar la respuesta espectral en el rango VIS-NIR del café tostado ante diferentes grados de tuestión.
- Implementar un modelo de predicción del grado de tuestión a partir de huellas espectrales de café
- Evaluar estadísticamente el desempeño del modelo de clasificación de café tostado con base en el protocolo Agron Gourmet Scale

2 MARCO DE TEORICO

2.1 TOSTIÓN DE CAFÉ

El tostado es un proceso físico-químico a través del cual las características iniciales de la materia prima (café verde) son alteradas para producir otros componentes, balanceando el sabor, la acidez, el sabor residual y el cuerpo del café de acuerdo a la necesidad del tostador y al gusto del cliente (Swisscontact, 2016). Se tienen 6 fases principales en el proceso de tostado de café, que son: secado, caramelización, transición térmica (crepitación o el primer crack), desarrollo del grano, y enfriamiento, figura 1. (Swisscontact, 2016).



Figura 1. Proceso de tostado de café. Fuente (Swisscontact, 2016).

Dependiendo del proceso de tueste, dos cafés pueden tener las mismas características visuales (mismo color) pero tener sabores completamente diferentes. Un tueste oscuro “duro” puede fácilmente tener sabor plano y amargo si los azúcares se quemaron en lugar de caramelizarse. Un tueste más suave puede desarrollar el color oscuro deseado, pero en la moderación de la temperatura, los azúcares se mantendrán dulces y sabores más sutiles podrán resaltar. Esto significa que el grado de tueste tiene una influencia decisiva sobre el desarrollo y concentración de los agentes aromáticos (Swisscontact, 2016).

El mejor nivel de tueste está directamente relacionado con los hábitos de cada país e incluso del paladar de los habitantes de cada zona específica en cada región. Estas diferencias han dado origen a la preferencia de ciertos grados o niveles de tueste, basados en el color Agtron gourmet Scale. (Swisscontact, 2016)

2.2 PROTOCOLO AGTRON GOURMET SCALE

La Asociación Americana de Cafés Especiales (SCAA) ha preparado un sistema de puntos para clasificar el grado - *el color* - de diferentes tipos de tostado. El sistema consiste en ocho discos de color numerados con los cuales se compara una muestra de café finamente molido y tostado, generalmente aplastado sobre un disco Petri. De esta manera se asigna al tostado un número aproximado en la llamada Agtron Gourmet Scale, que va desde el nº 95 (el tostado más claro) a intervalos de 10 hasta el nº 25 (el tostado común más oscuro) (UNCTAD/WTO, 2020). El grado de tueste puede clasificarse de manera general en tres tipos, claro, medio u oscuro, como se muestra en la figura 2:



Figura 2. Escala Agtron. Fuente (Swisscontact, 2016)

2.3 TEORÍAS DE COLOR

El color es una sensación producida por los rayos luminosos que impresionan a los órganos visuales y depende de la longitud de onda, la luz tal como se entiende es una parte de las ondas electromagnéticas que incluye los rayos X, ultravioleta (UV), rayos infrarrojos (IR), microondas (MO), radio, entre otros. El parámetro básico que diferencia estas radiaciones es la longitud de onda (λ). La franja del espectro comprendida entre los UV y los IR es a la que el ojo humano es sensible y por eso se denomina espectro visible (VIS), que comprende aproximadamente los 380 nm hasta los 780nm ($1nm = 10^{-9}m$) (Montesinos, 2003).

2.4 COLORÍMETRO

El colorímetro es un instrumento diseñado para dirigir un haz de luz paralela monocromática a través de una muestra líquida y medir la intensidad del haz luminoso emergente (Aparicio, 2017), Figura 3.

Según Aparicio (2017) las técnicas colorimétricas se basan en la medida de la absorción de radiación de la zona visible por sustancias coloreadas así que se denomina colorímetro a aquellos aparatos en los que la longitud con la que se desea trabajar se selecciona por medio de filtros ópticos. (aquatecnica, 2020). Uno de los colorímetros más usados para la medición del color de café es el Colorímetro CR-

410HS-C, Figura 4, el cual cuenta con un área de medición de \varnothing 50-53 mm. Usa como fuente de iluminación una Lámpara de xenón pulsante. Cuenta con un total de 100 colores para comparar con el espacio de color CIE en un rango de 400 a 700 nm (aquateknica, 2020). Los valores medidos por el CR-410HS-C pueden mostrarse en valores de tueste de la Agtron Gourmet Scale, o como niveles de tueste (medio, oscuro, medio oscuro, claro)(aquateknica, 2020).

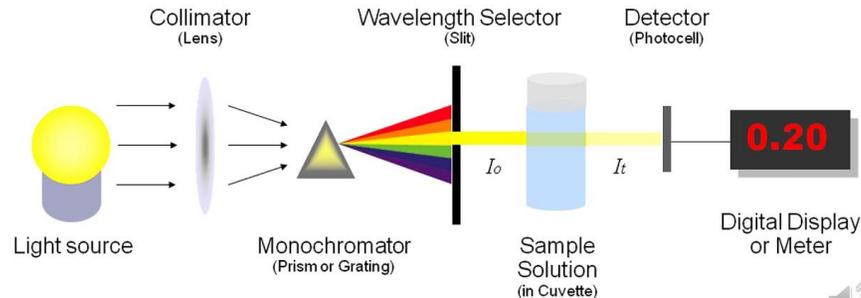


Figura 3. Funcionamiento básico del colorímetro. Fuente (Azam , 2020)



Figura 4. Colorímetro CR-410HS-C. Fuente (aquateknica, 2020)

2.5 ESPECTRÓMETRO ÓPTICO

El espectrómetro óptico es un instrumento capaz de medir la radiación de la luz entrante, también tiene la capacidad de medir transmitancia y reflectancia en rangos espectrales específicos, es decir que puede medir la intensidad cuantitativa o absoluta para el espectro electromagnético, en diferentes longitudes de onda (Caldentey, 2017).

La composición fundamental de un espectrómetro, Figura 5, consta de un sistema óptico de entrada, un sistema dispersivo para separar las partes espectrales de la

energía a medir, un sistema de detección de recolección para la energía radiante y un procesador de señal (Santos P. , 2009).

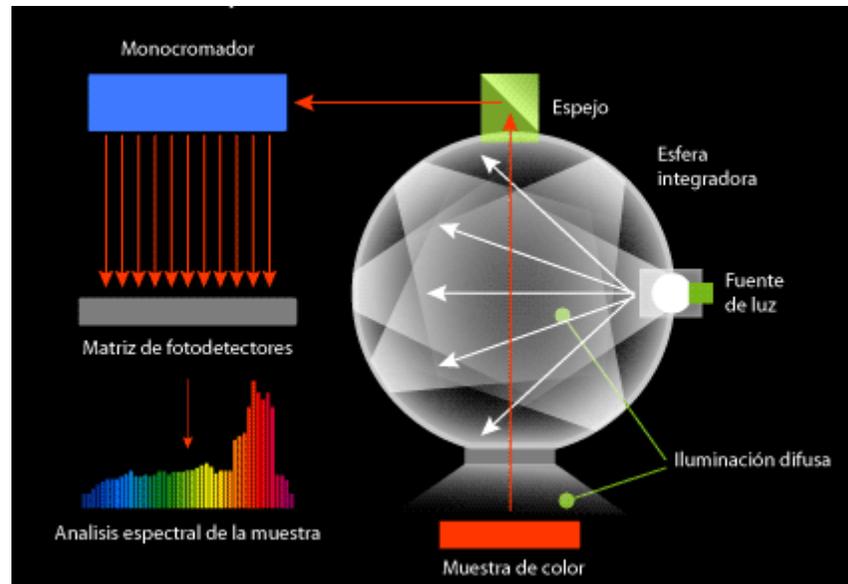


Figura 5. Funcionamiento de un espectrómetro. Fuente (Santos P. , 2009)

2.6 ESPACIOS DE COLOR

2.6.1 Espacio de color CIE

La Comisión Internacional de Iluminación y Color (CIE) propuso en 1931 un espacio de color estándar para describir numérica y gráficamente el color de cualquier objeto, ya sea opaco o transparente, que sigue vigente en la actualidad (Montesinos, 2003). El espacio de color definido por la CIE para fines aplicativos, se denota por CIELAB, este permite trabajar directamente con los atributos perceptuales del color (tono, claridad y colorido) (Montesinos, 2003). El sistema de color CIE $L^* a^* b^*$ (CIELAB) es un sistema cromático usado para describir los colores percibidos por el ojo humano, este sistema cuenta con tres parámetros que representan la luminosidad del color r (L^* , $L^*=0$ rendimientos negro y $L^*=100$ indica blanca), como se puede ver en la Figura 6, su posición entre rojo y verde (a^* , los valores negativos indican verde mientras que los valores positivos indican rojo) y su posición entre amarillo y azul (b^* , los valores negativos indican azul y los valores positivos indican amarillo), (García , Caballero , & Maldonado , 2016)

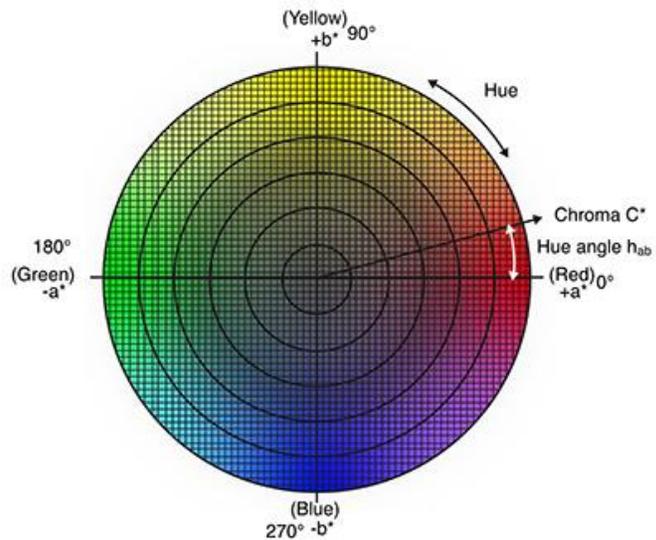


Figura 6. Espacio de color CIELAB. (Montesinos, 2003)

2.6.2 Espacio de color RGB

El espacio de color RGB es un modelo que codifica un color usando tres componentes: rojo (R), verde (G) y azul (B). Es un esquema de color aditivo que emplea el principio de la funcionalidad del ojo humano, es decir, la sensibilidad de tres tipos de conos en la retina a espectros de luz específicos. Por lo tanto, los colores visibles se pueden reproducir agregando varias intensidades de luces rojas, verdes y azules. El concepto de mezcla RGB se utiliza ampliamente en dispositivos de visualización y cámara que hacen que este modelo de color sea esencial para la mayoría de las aplicaciones de gráficos por computadora (Chernov, Alander, & Bochko, 2015). El espacio RGB se puede visualizar en forma de cubo en un sistema de coordenadas cartesianas tridimensionales (figura 7). El color negro está en el origen del eje, mientras que el color blanco se encuentra en la esquina diagonalmente opuesta. El resto de los vértices representan colores primarios (rojo, verde y azul) y colores secundarios (cian, amarillo y magenta) (Chernov, Alander, & Bochko, 2015).

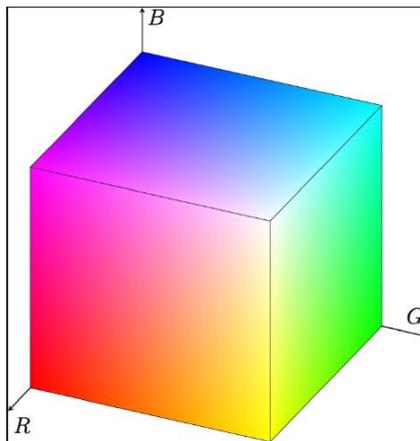


Figura 7. Cubo de color RGB. Fuente (Chernov, Alander, & Bochko, 2015)

2.7 ESPECTROSCOPIA DE INFRARROJO CERCANO (NIR)

La espectroscopia de infrarrojo cercano (NIR) es un tipo de espectroscopía vibracional que emplea energía de fotones ($h\nu$) en el rango de energía de 2.65×10^{-19} a 7.96×10^{-20} J, que corresponde al rango de longitud de onda de 750 a 2.500 nm. Este rango de energía es más alto de lo necesario para promover las moléculas solo a sus estados vibratorios excitados más bajos (a través de una transición vibratoria fundamental) y valores inferiores a los típicos necesarios para la excitación electrónica en las moléculas (a excepción de algunos compuestos de tierras raras). Su objetivo general es sondear una muestra para adquirir información cualitativa y/o cuantitativa proveniente de la interacción de las ondas electromagnéticas del infrarrojo cercano con sus componentes (Pasquini, 2003).

El espectro NIR se origina a partir de la energía de radiación transferida a la energía mecánica asociada con el movimiento de los átomos unidos por enlaces químicos en una molécula. A temperatura ambiente, la mayoría de las moléculas están en sus niveles fundamentales de energía vibracional. Los átomos o el grupo de átomos que participan en los enlaces químicos están desplazados uno en relación con el otro, en una frecuencia que se define por la fuerza del enlace y la masa de los átomos enlazados individuales o sus grupos. Las amplitudes de estas vibraciones son de unos pocos nanómetros y aumentarán si se transfiere algo de energía a la molécula. Esta energía puede transferirse desde un fotón de una longitud de onda dada (λ), para la cual la energía (E_p) puede ser dada por:

$$E_p = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (1)$$

en donde h es la constante de Planck y c es la velocidad de la luz (Pasquini, 2003).

2.8 REFLECTANCIA ESPECTRAL

La reflexión es el proceso donde una fracción del flujo de radiación incidente en una superficie, es regresado dentro del mismo hemisferio cuya base es la superficie que contiene el incidente de radiación. La reflexión puede ser especular (en la dirección del reflejo), difusa (dispersa en todo el hemisferio), o una combinación de ambas (Bass, 1994). La definición general para la reflectancia (ρ), es la relación de flujo radiante (φ_r), y el flujo radiante incidente (φ_i). (Bass, 1994).

$$\rho = \frac{\varphi_r}{\varphi_i} \quad (2)$$

La reflectancia espectral se define de manera similar teniendo en cuenta una longitud de onda específica (Bass, 1994).

$$\rho(\lambda) = \frac{\varphi_{\lambda r}}{\varphi_{\lambda i}} \quad (3)$$

El descriptor geométrico fundamental de reflectancia es la función de distribución de reflectancia bidireccional (f_r), se define como el elemento diferencial de irradiación reflejado (dL), en una dirección especificada por unidad de elemento diferencial de incidencia radiante (dE_i), también en una dirección especificada, su unidad de medida son los estereorradianes [sr^{-1}] (Bass, 1994).

$$f_r(\theta_i, \varphi_i, \theta_r, \varphi_r) = \frac{dL_r(\theta_i, \varphi_i; \theta_r, \varphi_r; E_i)}{dE_i(\theta_i, \varphi_i)} [sr^{-1}] \quad (4)$$

El ángulo polar (θ) se mide desde la superficie normal y el ángulo acimutal (φ) es medido desde una referencia arbitraria en el plano de la superficie, con mayor frecuencia el plano que contiene el haz incidente. Los subíndices (i y r) se refieren a los haces incidente y reflejado, respectivamente.

2.9 FILTRO DE SAVITZKY-GOLAY

El filtro de Savitzky-Golay es un filtro de suavizado descrito en 1964, este filtro se basa en el cálculo de una regresión polinomial local de grado k , con al menos $k + 1$ puntos equiespaciados, para determinar el nuevo valor de cada punto, el resultado será una función similar a los datos de entrada, pero suavizada.

La principal ventaja de esta aproximación es que tiende a conservar las características como lo es el ancho de los picos, los máximos y los mínimos relativos de la distribución inicial (Jean, Yves, & Jules, 1972).

2.10 CORRECCIÓN DE DISPERSIÓN MULTIPLICATIVA (MSC)

La corrección de dispersión multiplicativa (MSC) es una técnica de normalización que se utiliza con frecuencia en el infrarrojo cercano NIR para corregir las variaciones de escala y compensación en un conjunto de espectros. Estas variaciones son comunes y se deben a la dispersión o fenómenos físicos, así, para un espectro individual la ecuación que describe las contribuciones de la dispersión y señal espectral dada por un término aditivo y multiplicativo sería la siguiente:, (Windig, Shaver, & Bro, 2008).

$$x = a + b\hat{x} + e \quad (5)$$

Donde x representa el espectro de una muestra y \hat{x} representa el espectro de referencia que se supone contiene información similar a x y que generalmente se toma como el espectro promedio de todo el conjunto de datos de calibración (Windig, Shaver, & Bro, 2008).

2.10 SISTEMAS DE CLASIFICACIÓN

Los sistemas de clasificación pueden definirse en dos tipos: los supervisados y no-supervisados. El objetivo de los supervisados es predecir el valor de una medida de resultado basada en una serie de medidas de entrada; En el sistema no supervisado no existe una medida de resultado, y el objetivo es describir las asociaciones y patrones entre un conjunto de medidas de entrada (Hastie, Tibshirani, & Friedman, 2008). Según Parra (2019), la clasificación supervisada es una de las tareas que más frecuentemente son llevadas a cabo por los denominados Sistemas Inteligentes. Por lo tanto, un gran número de paradigmas desarrollados por la Estadística (Regresión Logística, Análisis Discriminante) o bien por la Inteligencia Artificial (Redes Neuronales, Inducción de Reglas, Árboles de Decisión, Redes Bayesianas) son capaces de realizar las tareas propias de la clasificación.

2.10.1 Redes neuronales artificiales

Una red neuronal es un sistema adaptativo que puede cambiar los parámetros de su estructura para clasificar un problema basado en la información interna o externa que fluye a través de la red. Una red neuronal también puede clasificarse como un instrumento de modelación no lineal y puede usarse para modelar sistemas con entradas y salidas complejas (Martinez & Mesa, 2019). Las redes perceptrón multicapa (MLP) son las redes neuronales más comúnmente usadas debido a su

rápida operación, fácil implementación y requieren pequeños conjuntos de datos para el entrenamiento. Una red está compuesta por una o más capas de neuronas con un alto grado de interconectividad: la capa de entrada, las capas ocultas y la capa de salida. La propagación de la información fluye en un solo sentido: desde la capa de entrada hacia las neuronas de la capa de salida (Martinez & Mesa, 2019). Las redes neuronales profundas son redes basadas en operaciones de convolución 2D, con muchos parámetros de entrenamiento, y requieren una gran cantidad de información de entrada. Cada neurona dentro de una red neuronal profunda es una matriz 2D que opera convoluciones a manera de filtros sobre la imagen (Martinez & Mesa, 2019).

2.10.2 Árboles de clasificación

Los árboles de clasificación reúnen una orientación de clasificación supervisada, la idea surge de la estructura de un árbol, compuesto de una raíz, nodos (posiciones donde las ramas se dividen), ramas y hojas; de manera similar un árbol de clasificación se edifica a través de nodos. Un árbol de decisión inicia en la raíz, se amplía hacia abajo y generalmente se dibuja de izquierda a derecha. El nodo de inicio se llama nodo inicial y los nodos de los extremos se conocen como nodos hoja. Dos o más ramas pueden extenderse desde cada nodo interno (Medina & Ñique , 2017).

2.10.3 Bosques aleatorios (Random Forest)

Los bosques aleatorios son una combinación de árboles de predicción de manera que cada árbol es dependiente de los valores de un vector aleatorio muestreado en forma independiente y con la misma distribución para todos los árboles del bosque (Breiman, 2001), así mismo (Medina & Ñique , 2017) afirman que *Random Forest* es la combinación de árboles predictivos que trabajan con una colección de árboles incorrelacionados y los promedia, donde cada árbol depende de los valores de un vector aleatorio de la muestra de forma independiente y teniendo la misma distribución de todos los árboles en el bosque. En todos los procedimientos para el k-ésimo árbol se genera un vector aleatorio θ_k , independiente de los últimos vectores aleatorios $\theta_1, \dots, \theta_{k-1}$ pero con la misma distribución; y un árbol se desarrolla usando el conjunto de datos de entrenamiento y de θ_k , lo que da como resultado un clasificador donde $h(x, \theta_k)$ es un vector de entrada.

En la etapa de entrenamiento, el algoritmo intenta optimizar los parámetros de las funciones *Split* a partir de las muestras de entrenamiento.

$$\theta_k^* = \operatorname{argmax}_{\theta_j \in \tau_j} I_j \quad (6)$$

Para ello se utiliza la función de ganancia de información:

$$I_j = H(J) - \sum_{i \in 1,2} \frac{|s_j^i|}{|s_j|} H(s_j^i) \quad (7)$$

donde S representa el conjunto de muestras que hay en el nodo por dividir, y s^j son los dos conjuntos que se crean de la escisión. La función mide la entropía del conjunto y depende del tipo de problema que abordamos (Breiman, 2001).

2.10.4 Máquinas de soporte vectorial (SVM)

Las máquinas de soporte vectorial (SVM), son un conjunto de algoritmos de aprendizaje supervisado desarrollados en 1995, que ha surgido como métodos de clasificación y regresión relacionado a la predicción de series de tiempo, mostrando ser mejores en comparación con los métodos tradicionales como modelos econométricos y en algunos casos a modelos de aprendizaje de máquina (Sanchez, 2015).

Para la clasificación de un modelo donde el conjunto de datos es linealmente separable, la SVM debe basarse en un conjunto de datos de entrenamiento y donde la superficie de decisión es un hiperplano que separa los patrones de entrenamiento en dos clases, según se encuentran a uno u otro lado del mismo. Se dispone entonces de un conjunto de N datos de entrenamiento llamados *patrones*, de la forma $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$ donde $x \in R$, cada escalar y_i corresponde a una de las dos clases que se identificarán como $+1$ y -1 . Se llamará vector de etiquetas al vector $y = y_1, y_2, \dots, y_N$. En un problema linealmente separable existen muchos hiperplanos que pueden clasificar los datos, pero la SVM halla el único hiperplano que maximiza la distancia entre él y el dato más cercano de cada clase, a esta distancia se le llama margen, y al hiperplano que la maximiza se le llama hiperplano de máximo margen o de separación óptima (HSO). El hiperplano de separación óptima está dado de manera general por $(w \cdot x) + b = 0$ donde $w, x \in R^n, b \in R$, donde el trabajo consiste en hallar el vector w de que contiene la ponderación de cada atributo, indicando que tanto aportan en el proceso de clasificación, tanto que b define el umbral de decisión (Jimenez L., 2010).

2.10.5 Auto-sklearn

Auto-sklearn permite optimizar automáticamente procesos de Aprendizaje Automático empleando una búsqueda bayesiana entre pipelines generados a través de métodos de la librería scikit-learn de Python. La optimización contempla las fases de ingeniería de características, selección de características, selección del modelo

(tanto de clasificación como de regresión) y optimización de sus hiperparámetros. Entre los métodos de ingeniería de características utilizados están la codificación one-hot, la estandarización de características numéricas, y PCA. Los pipelines generados utilizan modelos ensamblados (ensemble), una técnica que mejora los resultados del Aprendizaje Automático mediante la combinación de varios modelos. El framework de optimización bayesiana utilizado es SMAC3, desarrollado por los creadores de Auto-sklearn. Además, tiene soporte multihilo dando lugar a ejecuciones paralelas y permite restringir el espacio de búsqueda excluyendo fases del flujo y/o algoritmos a ser utilizados en cualquiera de dichas fases (Bender & Nicolet, 2020).

2.11 PUESTA EN PRODUCCION DE MODELOS DE MACHINE LEARNING

Cuando se dice que el modelo va a ser puesto en producción, se hace referencia a la integración del modelo de aprendizaje en una aplicación de lenguaje sencillo, atendiendo solicitudes de usuario en tiempo real, convirtiéndolo en un modelo dinámico. La etapa de producción es considerada la etapa final del ciclo de aprendizaje automático (Singh, 2021). Uno de los frameworks usados para poner modelos en producción es Streamlit, el cual es un framework de código abierto que facilita la creación de aplicaciones web para aprendizaje automático (streamlit.io, 2021). Streamlit permite utilizar código HTML dentro de un archivo Python y para el front-end usa formato CSS (Singh, 2021).

3 ESTADO DEL ARTE

En diversos estudios, se ha investigado la viabilidad de diferentes técnicas ópticas como alternativa a los métodos de referencia para determinar características de calidad del café, algunas de las técnicas ópticas más usadas se relacionan con la espectroscopia de infrarrojo cercano (NIR), y la óptica RGB. Santos, et al (2016), en su estudio utilizaron espectroscopia NIR para la adquisición de los espectros con una sonda de fibra óptica acoplada aun espectrómetro FT-NIR (FTLA2000, ABB) equipado con un detector de InGaAs, y la sonda puesta en una ventana de vidrio a 2 mm de distancia del tostador, tomando un total de 64 muestras dentro de un rango de longitudes de onda de 1000 a 2500 nm.

Santos, et al (2016), para la eliminación de datos atípicos y la identificación de las características del espectro NIR utilizaron PCA (Análisis de componentes principales) y para establecer modelos predictivos usaron regresión de datos parcial de mínimos cuadrados (PLS) entre los datos espectrales y el color en el espacio CIE L*a*b. El coeficiente de determinación (R^2) utilizado para evaluar la capacidad de los modelos para predecir el color del café tostado tuvo como resultado para el parámetro L 0.93, para el parámetro a* 0.85, y para el parámetro b* 0.91, mostrando la capacidad del modelo construido para identificar los cambios de color que tienen lugar en el proceso de tostado del café.

Otro estudio donde es utilizada la técnica de espectroscopia NIR es el realizado por Yergenson & Aston (2019), donde el tostado de café se realizó con un tostador de aire Fresh Roast SR500 con un control de temperatura de rango máximo 250 °C. Para la adquisición de los espectros se utilizó un espectrómetro NIR de transformada de Fourier Si-Ware NeoSpectra SWS62221-2.5 con un rango espectral de reflectancia difusa de 1350 a 2500nm. Las muestras se tomaron a través de un cable de fibra óptica de 550 μ m de diámetro y 0.5 m de longitud, puesto a una distancia de 3 cm de la cámara del tostador utilizando como fuente de luz dos bombillos halógenos de 50 W colocados en un ángulo de 45° desde la sonda de fibra óptica.

Yergenson & Aston (2019), generaron una variable de respuesta PLS a partir de la absorbancia NIR que se comparó con espectroscopia NIR medida con compensación de oscuridad, donde los valores representan el cambio en la absorbancia antes de cada crack. Para esto se tuvieron en cuenta 3 crack donde los dos primeros presentaron mejor resultado con un coeficiente de determinación $R^2= 0.99$.

Pizarro, et al (2007) también utilizaron esta técnica NIR en su trabajo, para la validación de color utilizaron un colorímetro Dr. Lange Spectro Color 45 ° / 0 ° con un rango de 400 a 700 nm, y para la captura de los espectros infrarrojo se utilizó un espectrofotómetro de infrarrojo cercano NIR Systems 5000 (FOSS, NIRSystems) equipado con un detector de reflectancia en un rango de 1100 a 2500 nm. En este

estudio mostraron la existencia de relaciones lineales o casi lineales entre los predictores (lo que se conoce como multicolinealidad). Así, en un espectro NIR, las variables (absorbancias en longitudes de onda) están altamente correlacionadas entre sí, con coeficientes de correlación > 0.999 en grandes intervalos del espectro.

Otras de las técnicas empleadas para medir el color de café tostado es la óptica RGB utilizada en trabajos como el de Virgen, et al (2016) y Samid, et al (2019), donde toman imágenes de café tostado con cámaras RGB. Virgen, et al (2016) utilizó una cámara RGB NI 1772C, con una resolución de 640×480 píxeles, controlando la fuente de luz desde un computador con el software NI Vision Builder para tomar imágenes de café tostado a tres temperaturas diferentes 400, 450 y 500°C.

Virgen, et al (2016), realizaron el procesamiento de imágenes con el software Matlab para convertir el espacio RGB de los píxeles de las imágenes al espacio L^*a^*b , con el fin de crear un modelo neuro-difuso que fue validado con un café americano usando los parámetros L^*a^*b predefinidos, obteniendo como resultado, para el tueste de 400°C un coeficiente de determinación >0.99 para 450°C >0.98 y 500°C >0.99 . Por su parte, en el trabajo realizado por Samid, et al (2019), utilizaron el sistema de adquisición de imágenes UVDI-254 de la empresa *Major Science*, que cuenta con una pantalla de transistor de película delgada TFT a color de 8 " y acceso frontal para intercambio de muestras. En su parte superior, hay una cámara Canon (Canon®), modelo Powershot G12 de resolución 10MP, y con temperatura de color de 6500 K. Samid, et al (2019), tuvieron la necesidad de construir un modelo de transformación de color para pasar del espacio RGB a el espacio L^*a^*b , y para predecir el valor Agtron / SCAA se realizó un modelo ANN (*artificial neural network*) el cual mostró significativamente el menor error, por lo que se definió como modelo de estimación del grado de tostado basado en valores CIE $L^* a^* b^*$ para granos enteros, y se eligió una red cuyo coeficiente de determinación fue 0.99. Los estudios más representativos donde se usaron técnicas ópticas para la determinación del color de café tostado se presentan en la Tabla 1.

Titulo	Referencia	Rango espectral /técnica	Análisis estadístico	Principales conclusiones
In-line monitoring of the coffee roasting process with near infrared spectroscopy: Measurement of sucrose and color	(Santos, et al., 2016)	1000 a los 2500 nm NIR	PCA y PLS	Los modelos desarrollados mostraron una buena capacidad de predicción (RER>10) en todos los casos, para diferentes variedades de café, donde se destaca la robustez técnica NIR y los métodos multivariados.
Neuro-fuzzy model based on digital images for the monitoring of coffee bean color during roasting in a spouted bed	(Virgen, Herrera, Corona, Arriola, & Guatemala, 2016)	400 a 700 nm RGB	Modelo Neuro-fuzzy, ANN	Aunque el modelo es bueno, se podría obtener un mejor resultado mediante el acoplamiento de algoritmos genéticos, o una versión híbrida, al modelo para determinar si hay funciones de pertenencia que describan mejor los cambios de color durante el tostado.
Near infrared spectroscopy: An analytical tool to predict coffee roasting degree	(Alessandrini, Romani, Pinnavaia, & DallaRosa, 2008)	800 a los 1250 nm NIR	PCA y PLS	Se demuestra la idoneidad de la espectroscopia NIR para construir modelos de regresión PLS robustos y confiables. Se predijeron diferentes grados de tuestión con alta precisión demostrando que esta técnica sirve para respaldar los análisis de tostado convencionales.
Simultaneous determination by NIR spectroscopy of the roasting degree and Arabica/Robusta ratio in roasted and ground coffee	(Bertonea, Venturelloa, Giraudoa, Pellegrino, & Geo, 2016)	1970 a 2242.66 nm, 1820 a 1889.64 nm y 1581 a 1751 nm. NIR	PCA y PLS	Se pudo demostrar que el NIR es una técnica de detección PLS2 rápida y confiable para evaluar las características del café utilizando enfoque multiparamétrico, aunque se requiere de un conjunto de datos más amplio que el usado en el estudio para mejorar su desempeño.
Monitoring coffee roasting cracks and predicting with in situ near-infrared spectroscopy	(Yergenson & Aston, 2019)	1000 a 2500 nm NIR	PCA y PLS	La espectroscopia NIR in situ proporciona una técnica de medición razonablemente precisa para la estimación del color, aunque se requiere trabajo adicional par apara comparar con métodos comunes como la escala AGTRON
Use of Near-Infrared Spectroscopy and Feature Selection Techniques for Predicting the Caffeine Content and Roasting Color in Roasted Coffees.	(Pizarro, Isabel , Gonzales, & Forina, 2007)	1100 a 2500 nm NIR	PCR, PCA y PLS	La aplicación de un pretratamiento espectral como la primera derivación mostró un éxito relativo en corregir, al menos parcialmente, la variación sistemática que surge de la dispersión o los cambios de la línea de base, porque, para casi todas las calibraciones métodos evaluados, su uso anterior proporcionó mejores resultados en comparación con el desarrollo directo de modelos de regresión sobre espectros de absorbancia
Recognition of coffee roasting degree using a computer vision system	(Samid, Alves, Groenner , Meira , & Fonseca, 2019)	400 a 700 nm RGB	Modelo polinomial, ANN	Los resultados muestran que el desarrollo de modelos de regresión permite un análisis preciso y objetivo del grado de tostado de granos enteros y molidos en base al espacio de color o escala de grises CIE L * a * b *. Se observó que la estimación del grado de tostado en granos enteros es más difícil que la estimación en granos molidos, siendo necesario el uso de ANN para el primer caso mientras que los modelos polinomiales cuadráticos fueron suficientes para el segundo

Tabla 1. Principales investigaciones del uso de técnicas ópticas para la determinación del color del café tostado.

Fuente autor

4 METODOLOGIA

Las unidades experimentales en esta investigación fueron muestras de café tostado de 50g, en diferentes grados de tuestión. El proceso de tuestión se llevó a cabo en una tostadora de lecho fluido. Se tomaron 10 muestras por cada grado de tuestión (*ligero, medio-ligero, medio, medio-alto y oscuro*) para un total de 50 muestras de café tostado. Para cada muestra se tomó su huella espectral, a través de medidas de reflectancia de luz del grano molido, con un espectrómetro Ocean Optics STS-VIS de rango espectral 350 – 800 nm y de resolución espectral 1.5nm, figura 8.

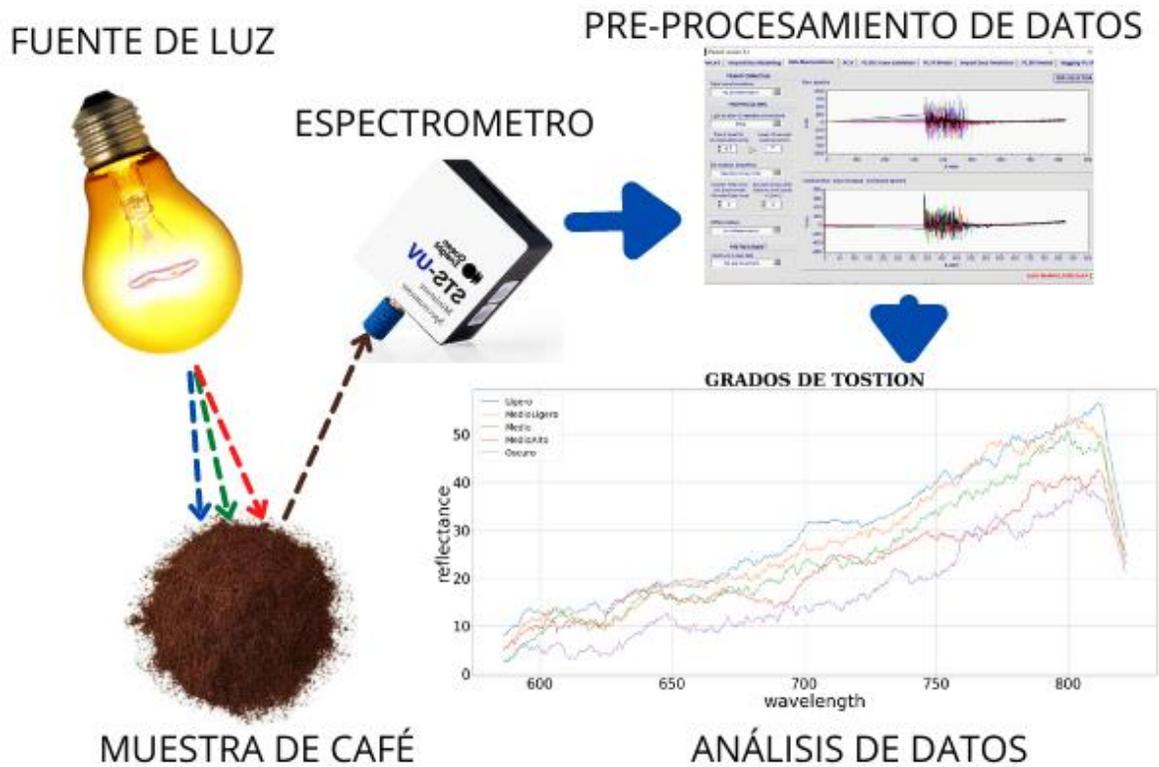


Figura 8. Diagrama de medición de la huella espectral de café tostado. Fuente autor

4.1 VARIABLES DE RESPUESTA

Las variables de respuesta que se propusieron para el análisis de la información son: la escala Agtron (indica el color definido por el protocolo SCAA), la reflectancia espectral (permite determinar el color medido por el espectrómetro óptico) y la firma espectral para la clasificación del color, ver tabla 2.

Variable	Descripción
Escala Agtron	Sistema de puntos para clasificar el grado - <i>el color</i> - de diferentes tipos de tostado
Reflectancia espectral	Es la fracción de radiación reflejada en cada zona del espectro electromagnético.
Firma espectral	Se conoce como la radiación reflejada en función de la longitud de onda

Tabla 2. Variables de respuesta. Fuente autor

4.2 MATERIALES

4.2.1 Colorímetro digital QUANTIK IR-800

Con el objetivo de medir el nivel de tuestado del café molido usando el protocolo SCAA, se usó el colorímetro EI IR-800, Figura 9. Este es un colorímetro digital que posee una fuente de emisión de radiación infrarroja que incide sobre la superficie de la muestra de café, donde es absorbida cierta cantidad, y la radiación que es reflejada, es cuantificada por el instrumento, en una escala relativa, definida por elementos de referencia (INDUSTRIAS QUANTIK, S.L., 2021).



Figura 9. colorímetro digital QUANTIK IR-800. Fuente autor.

Para la escala Agron la equivalencia correspondiente con el colorímetro IR-800 se presenta en la tabla 3 (Jimenez , Correa, & Diezma, 2011).

Descripción	QUANTIK	Agron
Muy oscuro	100	25
Oscuro	139	35
Medio Alto	173	45
Medio	202	55
Medio Ligero	228	65
Ligero	269	75
Muy ligero	330	85

Tabla 3. Equivalencia colorímetro IR-800 QUANTIK y escala Agron. (Jimenez , Correa, & Diezma, 2011).

4.2.2 Espectrómetro Ocean Optics STS-VIS

Para la realización del estudio, se utilizó un espectrómetro Ocean Optics STS-VIS de la empresa “Ocean Optics”, Figura 10.



Figura 10. Ocean Optics STS-VIS. Fuente (oceaninsight, 2021).

El Ocean Optics STS-VIS es un espectrómetro óptico calibrado radiométricamente con corrector de coseno, de conexión directa, versátil para aplicaciones que van desde mediciones de reflectancia, absorbancia de baja concentración y caracterización con láser de alta intensidad, con un rango espectral que va desde 350 nm hasta los 800 nm y resolución espectral de 1.5 nm (oceaninsight, 2021). Las características del Ocean Optics STS-VIS se presentan en la tabla 4.

Espectroscopia	Rango de onda	350nm-800nm
	Resolución óptica	1.5nm,12.0nm,3.0nm,6.0nm
	Tiempo de integración	10 μ s-10s
	Ruido oscuro	\leq 3 cuentas RMS
	Gama dinámica	5x10 ⁹ (sistema de integración máxima 10s)4600 adquisición única
	Conector de fibra de entrada	SMA 905
	Relación señal/ruido	>1500:1(señal completa)
	Luz extraviada	\leq 0.25%
Detector	Detector	CMOS
	Hendidura de entrada	10 μ m, 100 μ m, 200 μ m,25 μ , 50 μ m
	Lente de colección del detector	No
Físico	Dimensiones	40mmx42mmx24mm
	Peso	~60g

Tabla 4. Características Ocean Optics STS-VIS. Fuente (oceaninsight, 2021).

4.2.3 Sonda de reflexión VIS-NIR

La sonda de reflexión VIS-NIR, Figura 11, es una sonda de alta calidad diseñada para trabajos exigentes, tiene aplicaciones de uso industrial y de campo. Su material es acero inoxidable y mide 25 cm de largo, su temperatura de funcionamiento esta entre los -20°C y los 80°C, captura la luz de reflexión en el mismo ángulo que se ilumina y se utiliza para mediciones de reflexión difusa o especular (Caldentey, 2017).

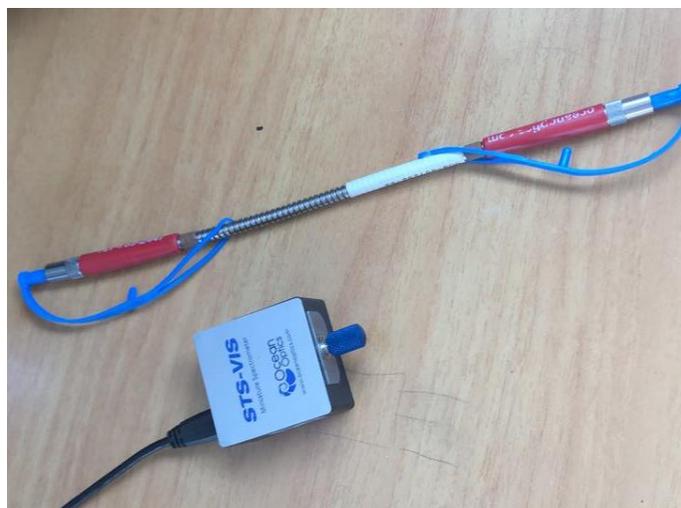


Figura 11. sonda de reflexión VIS-NIR. Fuente autor

4.2.4 Panel de reflectancia de calibración

El panel de reflectancia calibrada (CRP) que se muestra en la, Figura 12, ayuda a la calibración del espectrómetro, pues cada CRP tiene una curva de calibración asociada en todo el espectro visible e infrarrojo cercano. Los datos de calibración son proporcionados como reflectancia absoluta (un valor entre 0.0 y 1.0) en el rango de 400 nm a 850 nm (en incrementos de 1 nm) (MicaSense, 2021).



Figura 12. Panel de reflectancia calibrado (CRP). Fuente autor.

4.3 HERRAMIENTAS INFORMÁTICAS

Las herramientas informáticas son softwares móviles o de escritorio, para este estudio se usaron las siguientes herramientas informáticas.

- **SolidWorks:** es un software CAD (diseño asistido por computadora) para ordenador, en el que se hace modelado mecánico de piezas y ensamble tanto en 2D como en 3D, SolidWorks cuenta con paquetes de simulación de esfuerzos mecánicos o estudios de movimiento en ensambles (SOLIDWORKS®, 2021).
- **Ocean View:** es un software de espectroscopia basado en Java, capaz de controlar cualquier espectrómetro de la marca Ocean Optics y compatible con Windows, Mac OS o Linux, tiene base de comunicación USB (oceaninsight, 2021).
- **ParLeS:** es un software compartido que fue desarrollado para docencia e investigación tanto en quimiometría como en espectroscopia, con miras en

un software capaz de procesar espectros en tiempo real, entre las principales funciones de ParLeS se encuentra fusionar archivos espectroscópicos, realizar transformaciones espectroscópicas, cuenta con una amplia gama de preprocesamiento de datos, efectúa análisis de componentes principales (PCA), realiza regresión de mínimos cuadrados (PLSR), entre otros (Viscarra, 2007).

- **Python:** es un lenguaje de programación potente y de fácil aprendizaje, con eficaces estructuras de datos de alto nivel, ofrece una solución de programación orientada a objetos simple pero eficaz, lenguaje ideal para scripts y desarrollo rápido de aplicaciones (Drake, 2000).

4.4 ARTICULACIÓN DEL SISTEMA DE CAPTURA

El proceso de articulación del sistema de captura, Figura 13, para la adquisición de los espectros consta de 4 pasos.

- Paso 1: ensamble de la sonda y el espectrómetro
- Paso 2: conexión de espectrómetro y PC
- Paso 3: integración del espectrómetro en la caja de captura
- Paso 4: Calibración del blanco y oscuro de referencia



Figura 13. Sistema físico acoplado. Fuente autor

4.5 PREPARACIÓN DE LA MUESTRA

Para la preparación de la muestra se usó la caja de nivelación del colorímetro Quantik IR-800, Figura 14, donde se vierten aproximadamente 50g de café molido en una placa de Petri, posteriormente se pasa suavemente las cuchillas de la caja de nivelación para obtener una superficie homogénea.



Figura 14. Caja de nivelación. Fuente autor

4.6 SISTEMA DE CLASIFICACIÓN

4.6.1 Base de datos

Para la base de datos se tomaron 1500 espectros divididos en 5 grados de tuestión de café (*ligero, medio-ligero, medio, medio-alto y oscuro*), cada grado de tuestión aporta 300 espectros al *dataset*. Se usó el programa de captura (Ocean View) para almacenar los espectros en archivos de texto individuales. Luego se unieron los 300 espectros de cada grado de tuestión en un solo archivo de texto con la ayuda del software ParLeS 3.1.

4.6.2 Dataset

Para la construcción del *dataset* se concatenaron los 5 archivos de texto de cada grado de tuestión con los 300 espectros dando como resultado un solo *dataset* de 1501 filas por 1041 columnas, Figura 15. Las filas en el dataset representan cada huella espectral, y las columnas representan los valores de reflectancia para el rango de longitudes de onda de 338.239 nm a 822.296nm, y la etiqueta de cada muestra, es decir el grado de tuestión

```

      0      1      2      3      4      ...      1036      1037      1038      Y      E
0      0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    ...    821.310974    821.804016    822.296021    1    Ligero
1      0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    ...    66.669998    94.440002    66.669998    1    Ligero
2      0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    ...    57.139999    44.439999    58.820000    1    Ligero
3      0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    ...    35.709999    61.110001    88.239998    1    Ligero
4      0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    ...    50.000000    61.110001    70.589996    1    Ligero
..     ...     ...     ...     ...     ...     ...     ...     ...     ...     ...
296    0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    ...    47.830002    21.049999    40.910000    5    Oscuro
297    0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    ...    30.430000    26.320000    22.730000    5    Oscuro
298    0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    ...    47.830002    15.790000    40.910000    5    Oscuro
299    0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    ...    47.830002    42.110001    27.270000    5    Oscuro
300    0.0    0.0    0.0    0.0    0.0    ...    39.130001    31.580000    45.450001    5    Oscuro

```

[1501 rows x 1041 columns]

Figura 15. Dataset. Fuente autor

Para la construcción del sistema de clasificación se dividió el *dataset*, asignando un 80% de los datos para entrenamiento y un 20 % para prueba. Se tomó como variable dependiente la columna 1039 del conjunto de datos que corresponde a una asignación numérica para cada grado de tostión, de la siguiente manera (*ligero=1*, *medio-ligero=2*, *medio=3*, *medio-alto=4* y *oscuro=5*), ver Figura 12, y como variable independiente los valores de reflectancia de cada uno de los grados de tostión.

4.6.3 Implementación de los sistemas de clasificación

Se implementaron los sistemas de clasificación descritos en la Tabla 5, con el objetivo de evaluar su rendimiento y encontrar el mejor modelo, que permita luego a partir de un espectro de reflectancia inferir el grado de tostión del café molido.

	Sistema de clasificación	Parámetros usados en el entrenamiento
1	Redes neuronales (MLP)	Batch size, hidden_layer_sizes, solver, max_iter, epochs
2	Arboles de decisión (Random forest)	n_estimator, criterion, min_sample
3	Máquinas de soporte vectorial (SVM)	Kernel, C
4	Seleccionador de algoritmos y ajuste de hiperparámetros (Auto-sklearn)	time_left_for_this_task, include_estimators

Tabla 5. Sistemas de clasificación implementados. Fuente (autor)

4.7 METRICAS DE DESEMPEÑO

Las métricas de desempeño utilizadas para la evaluación de los modelos de clasificación implementados, fueron la matriz de confusión, recall, accuracy y f1-score.

La matriz de confusión, es una tabla con filas y columnas, que contabiliza las predicciones comparadas con los valores reales, es útil para mostrar de manera explícita cuándo una clase es clasificada correctamente o no. En la Tabla 6 se puede ver una matriz de confusión para un clasificador binario (Torres, 2020).

		Predicción	
		Positivos	negativos
Observaciones	Positivos	Verdaderos positivos (VP)	Verdaderos negativos (VN)
	negativos	Falsos positivos (FP)	Verdaderos negativos (VN)

Tabla 6. Matriz de confusión para una clasificación binaria. Fuente (Torres, 2020)

En una matriz de confusión se identifican los siguientes elementos:

- **VP** es la cantidad de positivos que fueron clasificados correctamente como positivo por el modelo.
- **VN** es la cantidad de negativos que fueron clasificados correctamente como negativos por el modelo.
- **FN** es la cantidad de positivos que fueron clasificados incorrectamente como negativos
- **FP** es la cantidad de negativos que fueron clasificados incorrectamente como positivos

Con esta matriz de confusión, se puede calcular el accuracy sumando los valores de la diagonal y dividiendo por el total, (Torres, 2020):

$$accuracy = \frac{VP + VN}{VP + FP + VN + FN} \quad (8)$$

El recall indica qué también el modelo evita los falsos negativos, (Torres, 2020)

$$Recall = \frac{VP}{VP + FN} \quad (9)$$

La métrica de desempeño f1-score, como menciona Borja, et al (2020), es una métrica que combina las dos anteriores siendo la media armónica entre accuracy y recall:

$$F1\ score = \frac{accuracy * Recall}{accuracy + Recall} \quad (10)$$

5 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

5.1 SISTEMA DE CAPTURA

Se realizó la captura de imágenes espectrales de los diferentes grados de tuestión utilizando el equipo de espectroscopia de infrarrojo cercano (NIR). Para esto se diseñó y construyó una caja de madera de 50x50x50 cm, Figura 16, este *enclosure* experimental fue parte del trabajo de investigación del Ph.D (c) Diego Campo Ceballos en su estudio sobre el color y matiz del café tostado Campo, et al (2018), Para el diseño se usó el software SolidWorks, la caja tiene como objetivo evitar la incidencia de luz externa sobre la muestra, y así poder asegurar un mejor procedimiento y validez de los resultados.

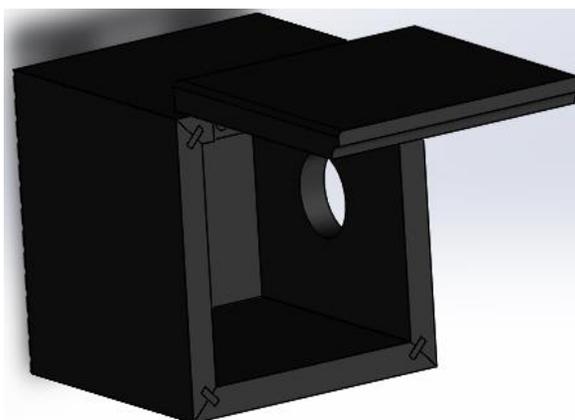


Figura 16. Diseño en SolidWorks de la caja. Fuente autor

Con la caja de madera (7), se estructuró el sistema de captura, ver Figura 17, conformado por: espectrómetro óptico (3), equipo de cómputo (1), panel de calibración (5), sonda de reflexión (4), fuente de luz (6) y colorímetro (2).

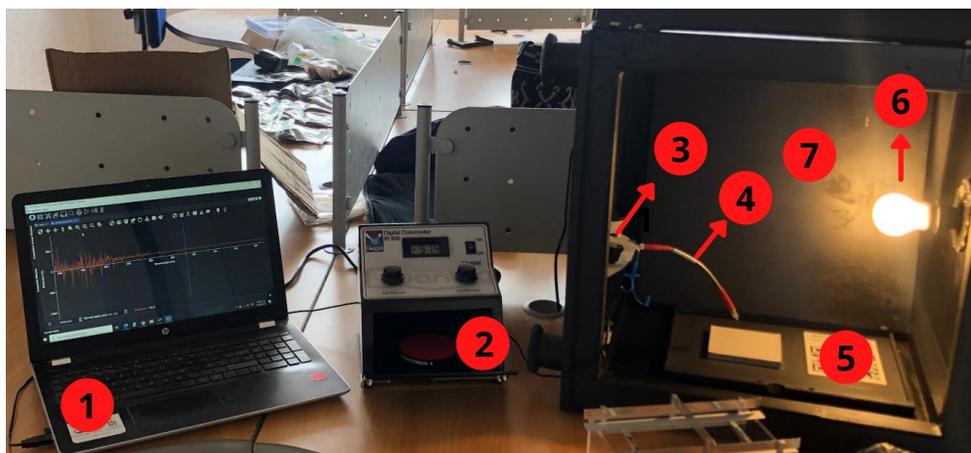


Figura 17. Sistema de captura. Fuente autor

5.2 TOMA DE DATOS CON COLORÍMETRO IR 800

Con el colorímetro IR-800 y su escala de color pre-establecida se clasificó cada grado de tuestión de las muestras de café, ver Figura 18. Se obtuvieron 5 grados de tuestión y de cada grado de tuestión 10 muestras. Se hicieron 100 capturas por cada grado de tuestión con el colorímetro IR-800, Figura 19, donde se obtuvieron 500 registros en total.



Figura 18. Muestras de café clasificado por grado de tuestión. Fuente autor



Figura 19. Toma de muestras con colorímetro IR-800. Fuente autor

Con el objetivo de hallar los datos atípicos de cada grado de tuestión en el conjunto de datos tomados por el colorímetro se calculó, para cada grado de tuestión, los valores de los primeros y terceros cuartiles, el rango intercuartílico, valores mínimos, valores máximos, bigote inferior y superior, ver Tabla 7.

Grado de tostión	Primer cuartil	Tercer cuartil	Rango intercuartílico	Valor mínimo	Valor máximo	Bigote inferior	Bigote superior	Valores atípicos
Ligero	272.75	321	48.25	268	335	200.375	393.375	0
Medio-Ligero	231.75	265	33.25	225	272	181.875	314.875	0
Medio	209.75	220	10.25	190	236	194.375	235.375	2
Medio-Alto	175.75	190	14.25	170	209	154.375	211.375	0
Oscuro	148.75	160	11.25	129	174	131.875	176.875	2

Tabla 7. Datos estadísticos tomados con colorímetro IR-800. Fuente autor

Se hallaron un total de cuatro datos atípicos que se presentan gráficamente en la Figura 20, dos para el grado de tostión medio cuyos valores son 236 y 190, y dos para el grado de tostión oscuro con valores 129 y 130. Los datos de cada grado de tostión muestran una distribución normal por lo que estos valores atípicos son esperables, y ya que no están presentes en todas las medidas de la muestra no se considera necesario excluirla.

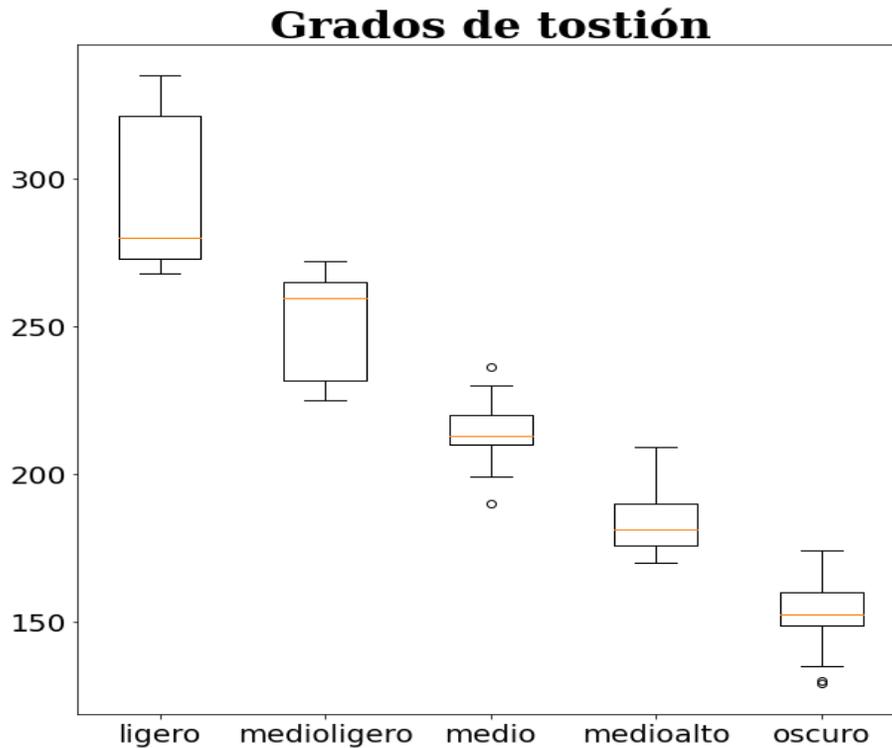


Figura 20. Diagramas de caja y alambre datos colorímetro IR-800. Fuente autor

En la Figura 17, se presenta el diagrama de cajas y alambres para cada grado de tostión. Los valores obtenidos usando el colorímetro, son proporcionales al grado de tostión.

Los grados de tostión ligero y medio-ligero son los de mayor dispersión, esto debido a que su rango es más amplio. La medida de dispersión del grado de tostión medio fue la menor, aunque se presentaron datos atípicos. Aunque los valores medios para cada grado de tostión, se muestran claramente diferenciables, la distribución de los datos en cada rango presenta solapamiento con los grados de tostión vecinos.

5.3 PREPROCESAMIENTO

El pre-procesado de los espectros se hizo en el software ParLeS 3.1, ver Figura 21. Se aplicó para cada huella espectral de cada grado de tostión el filtro de Savitzky-Golay para suavizado de los datos y corrección de dispersión multiplicativa (MSC) con el fin de corregir las variaciones de escala.

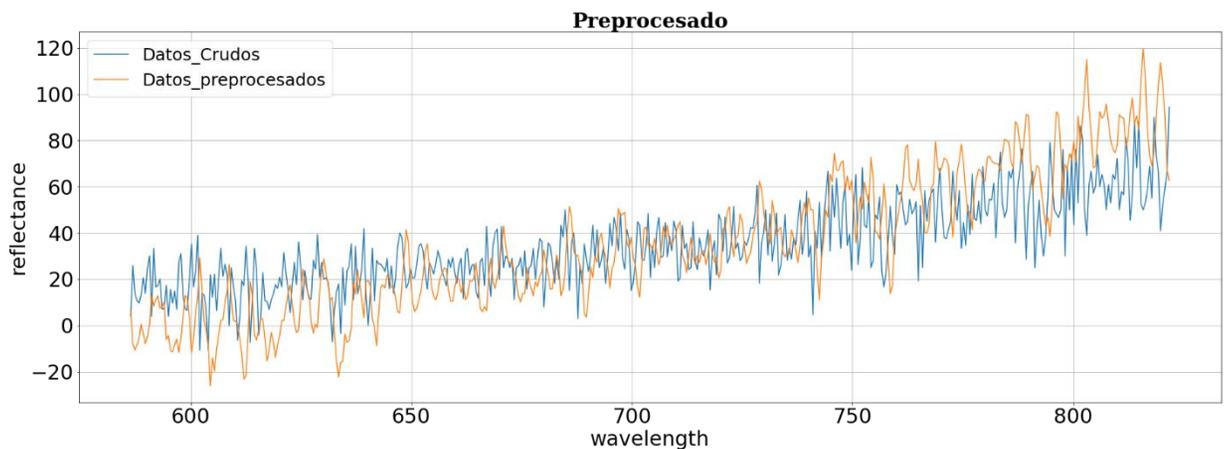


Figura 21. Pre-procesado con ParLeS 3.1. Fuente autor

El pre-procesamiento de los datos en el software ParLeS mostró que al aplicar el filtro de Savitzky-Golay se produjo un suavizado para las variaciones de alta frecuencia. La corrección de dispersión multiplicativa (MSC), al efectuarse usando un espectro ideal, que regularmente es el espectro medio del conjunto de muestras, modificó el espectro desplazándolo ligeramente de su posición original. Los resultados mostraron que, en las huellas espectrales del café tostado, se presentaban mayores valores de reflectancia a longitudes de onda más cercanas al NIR. Estos resultados concuerdan con investigaciones como la presentada en (Fiore, Romaniello, Severini, & Peri, 2006), donde a partir de la observación de la reflectancia relativa del color de café, durante el proceso de tostión determinaron que a medida que la tostión se hacía más oscura la reflectancia disminuía, sugiriendo que a menor longitud de onda menor reflectancia.

5.4 FORMACIÓN DE LA BASE DE DATOS

Para la creación de la base de datos se tomaron 1500 espectros de los 5 grados de tostión (*ligero, medio-ligero, medio, medio-alto y oscuro*) con el software Ocean View. Estos se guardaron individualmente en un archivo de texto, luego fue necesario unirlos usando el software de pre-procesamiento ParLeS 3.1, ver Figura 22. La primera fila representa la longitud de onda y las filas siguientes representan la reflectancia de cada espectro, el número de filas del documento, corresponde con el número de muestras totales tomadas. Se crearon dos bases de datos, una con los espectros pre-procesados y otro con los datos crudos, con el objetivo de evaluar cuál obtenía el mejor desempeño en los modelos de clasificación.

Para analizar la tendencia de la huella espectral de cada grado de tostión, se graficó un espectro de cada uno, ver Figura 23. Se encontró que a pesar que en las longitudes de onda más bajas se hace difícil diferenciar entre los espectros, en las longitudes de onda más altas se pueden diferenciar levemente.

35	36	37	38	39	...	999	1000	1001
347.316010	347.769989	348.223999	348.678986	349.132996	...	803.112000	803.603027	804.093994
-25.000000	0.000000	16.670000	0.000000	0.000000	...	38.889999	60.869999	66.669998
33.330002	100.000000	0.000000	-200.000000	60.000000	...	46.669998	47.619999	38.889999
-66.669998	400.000000	133.330002	400.000000	40.000000	...	46.669998	71.430000	77.779999
0.000000	500.000000	133.330002	400.000000	40.000000	...	60.000000	57.139999	33.330002

Figura 22. Unión de espectros en un solo archivo. Fuente autor

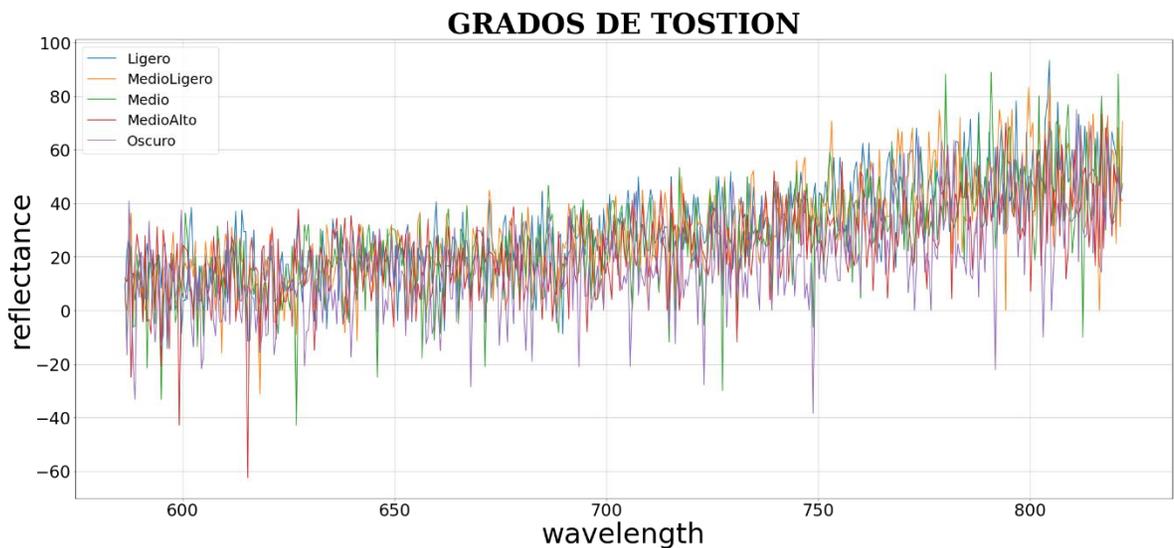


Figura 23. Espectros de cada grado de tostión. Fuente autor

5.5 MODELOS DE CLASIFICACIÓN

Los modelos de clasificación que se tuvieron en cuenta para este estudio fueron, redes neuronales (MLP), árboles de decisión (*Random Forest*), máquinas de soporte vectorial (SVM) y la técnica de automl (*Autosklearn*). Las métricas de desempeño consideradas para evaluar cada modelo fueron: recall, f1-score, precisión y accuracy, siendo esta última la métrica seleccionada para elegir el modelo final, ya que todos los grados de tostión tienen igual prioridad en el proceso de clasificación. Además, el accuracy permite evaluar el desempeño general del modelo, considerando todas las clases. Se usó el f1-score para evaluar el rendimiento en cada grado de tostión ya que permite combinar las medidas de precisión y recall en un promedio armónico, a partir de los falsos positivos y negativos, presentados en la matriz de confusión de cada modelo.

Para la clasificación se tuvieron en cuenta los datos crudos y pre-procesados, dividiendo cada base de datos en 20% para datos de prueba (*300 espectros*) y 80 % para datos de entrenamiento (*1200 espectros*).

Se probaron los modelos para tener una visión general del desempeño de cada uno. Para cada modelo se usó el dataset de entrenamiento para su ajuste, y se usó el dataset de prueba para la evaluación de su desempeño. También se integró la técnica de AutoML para encontrar modelos de mejor desempeño. El modelo de AutoML se llevó a cabo en dos etapas, para un tiempo de 120 y 300 minutos con los clasificadores SVM, MLP y Random forest. El modelo ejecutado durante 120 minutos obtuvo el mejor desempeño con un clasificador SVM (accuracy=0.95). Para el modelo final se utilizó el mejor clasificador del modelo de 120 minutos realizando una sintonización fina consiguiendo un mejor desempeño (accuracy=0.96).

5.5.1 Redes Neuronales

Para el modelo de redes neuronales se utilizó una red perceptrón multicapa (MLP), de la biblioteca de aprendizaje automático Scikit-learn, se implementó con los parámetros mostrados a continuación:

- Una capa oculta con 100 neuronas
- Función de activación "ReLU"
- Optimizador "Adam" (optimizador estocástico)
- Tasa de aprendizaje de 0.001
- Batch size igual a 200
- 200 épocas.

En la Tabla 8, se presentan las métricas de rendimiento obtenidas por el modelo construido a partir del algoritmo de redes neuronales, usando los espectros del conjunto de datos de test. En la Figura 24, se puede ver representado el rendimiento del modelo en la matriz para los datos crudos y pre-procesados.

Grado de tosti3n	Datos crudos			Datos pre-procesados		
	recall	f1-score	Precisi3n	recall	f1-score	Precisi3n
Ligero	0.83	0.77	0.71	0.73	0.78	0.83
Medio-Ligero	0.55	0.57	0.60	0.57	0.56	0.55
Medio	0.58	0.58	0.57	0.62	0.62	0.62
Medio-Alto	0.98	0.93	0.88	0.97	0.91	0.87
Oscuro	0.63	0.71	0.81	0.68	0.69	0.71

Accuracy Modelo redes neuronales datos crudos	0.72
Accuracy Modelo redes neuronales datos pre-procesados	0.71

Tabla 8. M3tricas de modelo de redes neuronales. Fuente autor

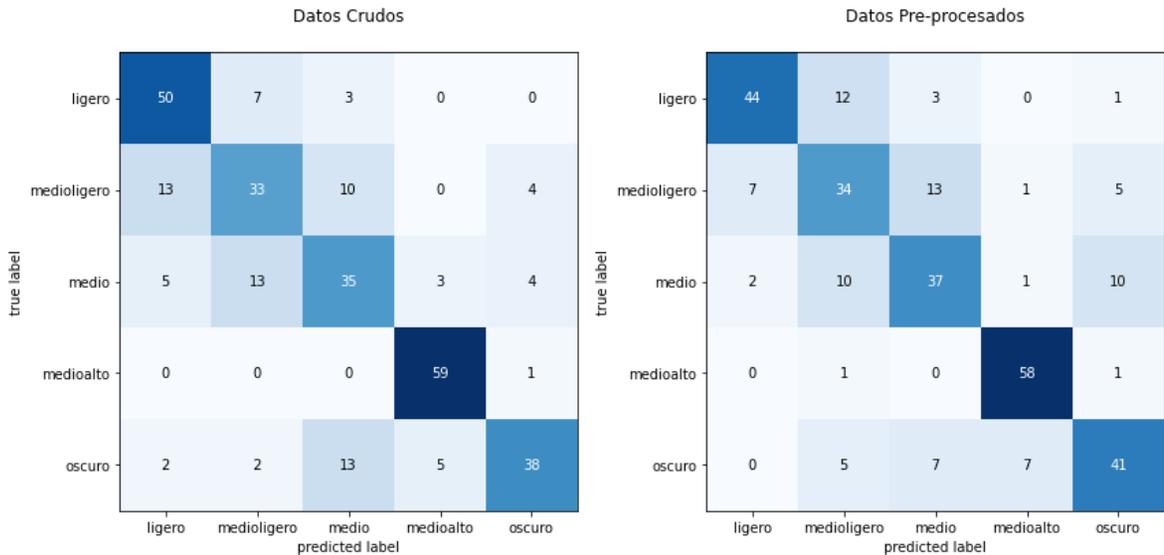


Figura 24. Matriz de confusi3n para redes neuronales. Fuente autor

Para el modelo construido a partir de los datos crudos, el grado de tosti3n de mejor rendimiento fue el Medio-Alto (f1-score=0.93), teniendo un total de 1 error, confundi3ndose con el grado de tosti3n oscuro. El grado de tosti3n de peor rendimiento fue el Medio-Ligero (f1-score=0.57) con un total de 27 errores confundi3ndose en 13 ocasiones con el grado ligero, en 10 ocasiones con el medio y en 4 ocasiones con el grado oscuro.

Para el modelo construido a partir de datos pre-procesados, el grado de tosti3n de mejor rendimiento fue el Medio-Alto (f1-score=0.91), teniendo un total de 2 errores, confundi3ndose en 1 ocasi3n con el grado de tosti3n Medio-Ligero y en 1 ocasi3n con el grado de tosti3n Oscuro. El grado de tosti3n de peor rendimiento fue el Medio-Ligero (f1-score=0.56) con un total de 26 errores confundi3ndose en 7 ocasiones

con el grado Ligero, en 13 ocasiones con el Medio, en 1 ocasión con el Medio-Alto y en 5 ocasiones con el grado oscuro.

El modelo de mejor rendimiento para redes neuronales fue el construido a partir de los datos crudos (accuracy =0.72), comparado con el modelo construido a partir de datos pre-procesados (accuracy =0.71).

5.5.2 Random forest

Para el modelo Random forest se usó el algoritmo de aprendizaje supervisado de la biblioteca de aprendizaje automático Scikit-learn, se utilizó con sus parámetros por defecto, de estos los parámetros más importantes son:

- n_estimators=100
- criterion='mse'
- min_samples_split=2
- min_samples_leaf=1

En la Tabla 9, se pueden ver representadas las métricas de rendimiento conseguidas por el modelo construido a partir del algoritmo de Random forest, usando los espectros del conjunto de datos de test. En la Figura 25 se presenta el rendimiento del modelo en la matriz de confusión para los datos crudos y pre-procesados.

Grado de tostión	Datos crudos			Datos pre-procesados		
	recall	f1-score	Precisión	recall	f1-score	Precisión
Ligero	0.92	0.93	0.95	0.97	0.92	0.88
Medio-Ligero	0.83	0.83	0.82	0.78	0.78	0.77
Medio	0.78	0.82	0.87	0.68	0.75	0.84
Medio-Alto	0.98	0.98	0.98	0.97	0.97	0.97
Oscuro	0.98	0.93	0.88	0.92	0.89	0.86

Accuracy Modelo Random forest datos crudos	0.90
Accuracy Modelo Random forest datos pre-procesados	0.86

Tabla 9. Métricas de modelo de Random forest. Fuente autor.

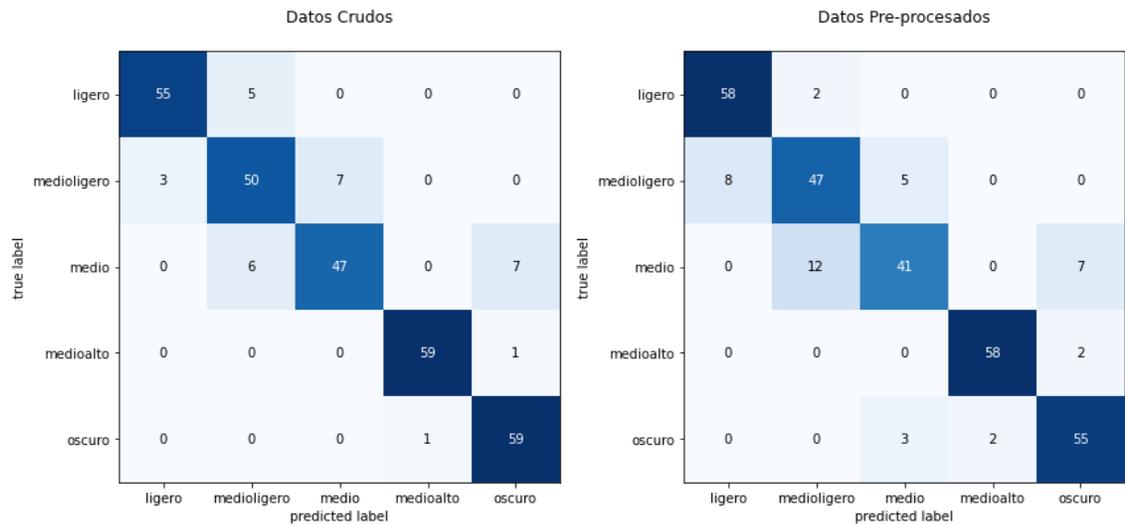


Figura 25. Matriz de confusión para Random forest. Fuente autor.

Para el modelo construido a partir de los datos crudos, el grado de tostión de mejor rendimiento fue el Medio-Alto (f1-score=0.98), teniendo un total de 1 error, confundiéndose con el grado de tostión oscuro. El grado de tostión de peor rendimiento fue el Medio (f1-score=0.82) con un total de 13 errores confundiéndose en 6 ocasiones con el grado Medio-Ligero y en 7 ocasiones con el grado oscuro.

Para el modelo construido a partir de datos pre-procesados, el grado de tostión de mejor rendimiento fue el Medio-Alto (f1-score=0.97), teniendo un total de 2 errores, confundiéndose en 2 ocasiones con el grado de tostión Oscuro. El grado de tostión de peor rendimiento fue el Medio (f1-score=0.75) con un total de 19 errores confundiéndose en 12 ocasiones con el grado Medio-Ligero y en 7 ocasiones con el grado Oscuro.

El modelo de mejor rendimiento para Random forest fue el construido a partir de los datos crudos (accuracy =0.90), comparado con el modelo construido a partir de datos pre-procesados (accuracy =0.86).

5.5.3 Máquinas de soporte vectorial (SVM)

Para el modelo de máquinas de soporte vectorial (SVM) se usó el algoritmo de clasificación de vectores SVM de la biblioteca de aprendizaje automático Scikit-learn, se utilizó con los siguientes parámetros para el entrenamiento:

- kernel='linear'
- C=100

En la Tabla 10, se presentan las métricas de rendimiento obtenidas por el modelo construido a partir del algoritmo SVM, usando los espectros del conjunto de datos

de test. En la Figura 26, se puede ver el rendimiento del modelo en la matriz de confusión para los datos crudos y pre-procesados.

Grado de tostión	Datos crudos			Datos pre-procesados		
	recall	f1-score	Precisión	recall	f1-score	Precisión
Ligero	0.93	0.91	0.89	0.98	0.93	0.88
Medio-Ligero	0.80	0.83	0.86	0.82	0.85	0.89
Medio	0.90	0.91	0.92	0.77	0.79	0.82
Medio-Alto	0.98	0.97	0.95	1.00	0.94	0.90
Oscuro	0.98	0.98	0.98	0.82	0.85	0.89

Accuracy Modelo SVM datos crudos	0.92
Accuracy Modelo SVM datos pre-procesados	0.87

Tabla 10. Métricas de modelo SVM. Fuente autor.

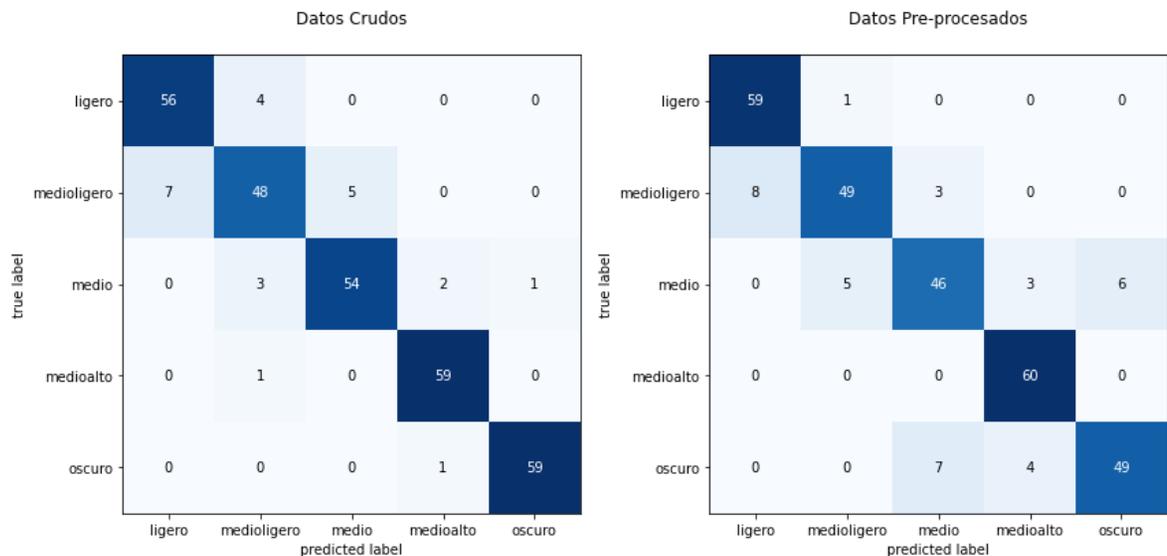


Figura 26. Matriz de confusión para SVM. Fuente autor

Para el modelo construido a partir de los datos crudos, el grado de tostión de mejor rendimiento fue el Oscuro (f1-score=0.98), teniendo un total de 1 error, confundiéndose con el grado de tostión Medio-Alto. El grado de tostión de peor rendimiento fue el Medio-Ligero (f1-score=0.83) con un total de 12 errores confundiéndose en 7 ocasiones con el grado Ligero y en 5 ocasiones con el grado Medio.

Para el modelo construido a partir de datos pre-procesados, el grado de tostión de mejor rendimiento fue el Medio-Alto (f1-score=0.94), teniendo un total de 0 errores. El grado de tostión de peor rendimiento fue el Medio (f1-score=0.79) con un total de

14 errores confundiendo en 5 ocasiones con el grado Medio-Ligero, en 3 ocasiones con el Medio-Alto y en 6 ocasiones con el grado Oscuro.

El modelo de mejor rendimiento para el SVM fue el construido a partir de los datos crudos (accuracy =0.92), comparado con el modelo construido a partir de datos pre-procesados (accuracy =0.87).

5.5.4 Auto-sklearn 120 minutos

Para este modelo de Auto-sklearn se utilizó un tiempo de 120 minutos y el kit de aprendizaje automático de la biblioteca de Scikit-learn, se utilizó con los siguientes parámetros para el entrenamiento:

- time_left_for_this_task=120*60
- include_estimators=["libsvm_svc","mlp","random_forest"]

Este entrenamiento se realizó teniendo en cuenta los modelos MLP, SVM y Random forest. El modelo que mejor desempeño tuvo para los datos crudos fue el SVM (accuracy =0.95), seguido del modelo Random forest (accuracy =0.87), y el de peor desempeño de los tres modelos fue el MLP (accuracy =0.73). Para los datos pre-procesados el modelo que mejor desempeño tuvo fue el SVM (accuracy =0.86), seguido del modelo Random forest (accuracy =0.83), y el de peor desempeño fue el MLP (accuracy =0.67)

En la Tabla 11, se presentan las métricas de rendimiento obtenidas por el modelo de mejor desempeño (SVM), usando los espectros del conjunto de datos de test. En la Figura 27, se puede ver representado el rendimiento del modelo en la matriz de confusión para los datos crudos y pre-procesados.

Grado de tostión	Datos crudos			Datos pre-procesados		
	recall	f1-score	Precisión	recall	f1-score	Precisión
Ligero	0.98	0.98	0.98	0.98	0.92	0.87
Medio-Ligero	0.95	0.93	0.90	0.68	0.75	0.82
Medio	0.90	0.92	0.95	0.78	0.79	0.80
Medio-Alto	0.98	0.97	0.95	0.98	0.94	0.89
Oscuro	0.95	0.97	0.98	0.90	0.92	0.95

Accuracy Modelo Auto-sklearn 120 minutos datos crudos	0.95
Accuracy Modelo Auto-sklearn 120 minutos datos pre-procesados	0.86

Tabla 11. Métricas de modelo Auto-sklearn 120 minutos. Fuente autor.

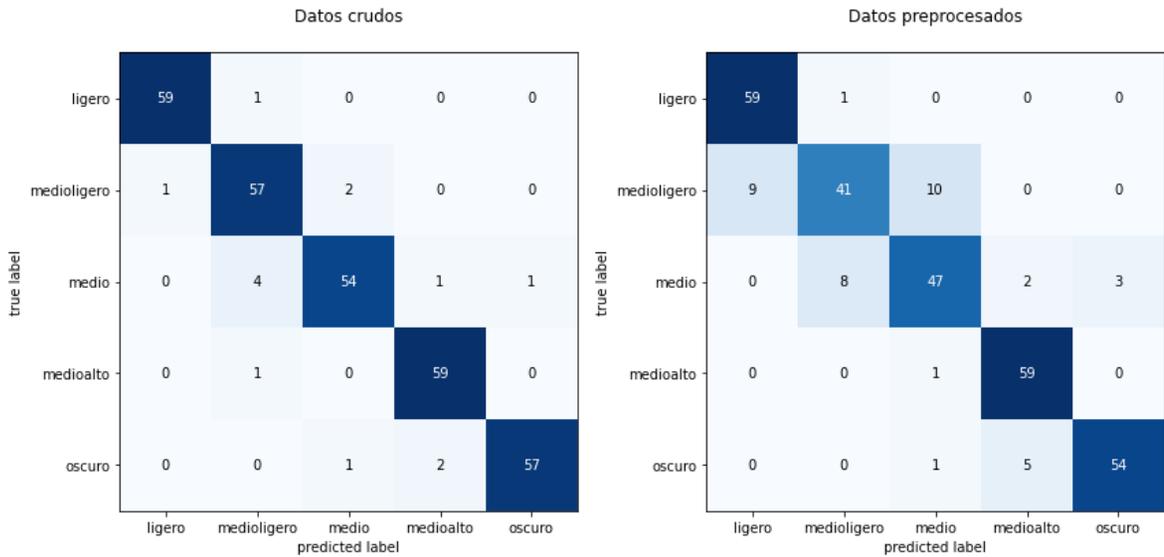


Figura 27. Matriz de confusión para Auto-sklearn 120 minutos. Fuente autor

Para el modelo construido a partir de los datos crudos, el grado de tostión de mejor rendimiento fue el Ligero ($f1\text{-score}=0.98$), teniendo un total de 1 error, confundiéndose con el grado de tostión Medio-Ligero. El grado de tostión de peor rendimiento fue el Medio ($f1\text{-score}=0.92$) con un total de 6 errores, confundiéndose en 4 ocasiones con el grado Medio-Ligero, en 1 ocasión con el grado Medio-Alto y en 1 ocasión con el grado Oscuro.

Para el modelo construido a partir de datos pre-procesados, el grado de tostión de mejor rendimiento fue el Medio-Alto ($f1\text{-score}=0.94$), teniendo un total de 1 error, confundiéndose con el grado de tostión Medio. El grado de tostión de peor rendimiento fue el Medio-Ligero ($f1\text{-score}=0.75$) con un total de 19 errores confundiéndose en 9 ocasiones con el grado Ligero y en 10 ocasiones con el grado Medio.

El modelo de mejor rendimiento para el Auto-sklearn 120 minutos fue el construido a partir de los datos crudos ($\text{accuracy}=0.95$), comparado con el modelo construido a partir de datos pre-procesados ($\text{accuracy}=0.86$).

5.5.5 Auto-sklearn 300 minutos

Para este modelo de Auto-sklearn se utilizó un tiempo de 300 minutos y el kit de aprendizaje automático de la biblioteca de Scikit-learn, se utilizó con los siguientes parámetros para el entrenamiento:

- `time_left_for_this_task=300*60`
- `include_estimators=["libsvm_svc","mlp","random_forest"]`

Este entrenamiento se realizó teniendo en cuenta los modelos MLP, SVM y Random forest. El modelo que mejor desempeño tuvo para los datos crudos fue el SVM (accuracy =0.94), seguido del modelo Random forest (accuracy =0.89), y el de peor desempeño de los tres modelos fue el MLP (accuracy =0.74). Para los datos pre-procesados el modelo que mejor desempeño tuvo fue el SVM (accuracy =0.88), seguido del modelo Random forest (accuracy =0.75), y el de peor desempeño fue el MLP (accuracy =0.69),

En la Tabla 12, se presentan las métricas de rendimiento obtenidas por el modelo de mejor desempeño (SVM), usando los espectros del conjunto de datos de test. En la Figura 28, se puede ver representado el rendimiento del modelo en la matriz de confusión para los datos crudos y pre-procesados.

Grado de tostión	Datos crudos			Datos pre-procesados		
	recall	f1-score	Precisión	recall	f1-score	Precisión
Ligero	0.95	0.97	0.98	0.97	0.91	0.87
Medio-Ligero	0.95	0.93	0.90	0.80	0.84	0.89
Medio	0.90	0.92	0.93	0.75	0.80	0.85
Medio-Alto	0.98	0.97	0.95	0.98	0.95	0.92
Oscuro	0.93	0.94	0.95	0.92	0.90	0.89

Accuracy Modelo Auto-sklearn 300 minutos datos crudos	0.94
Accuracy Modelo Auto-sklearn 300 minutos datos pre-procesados	0.88

Tabla 12. Métricas de modelo Auto-sklearn 300 minutos. Fuente autor.

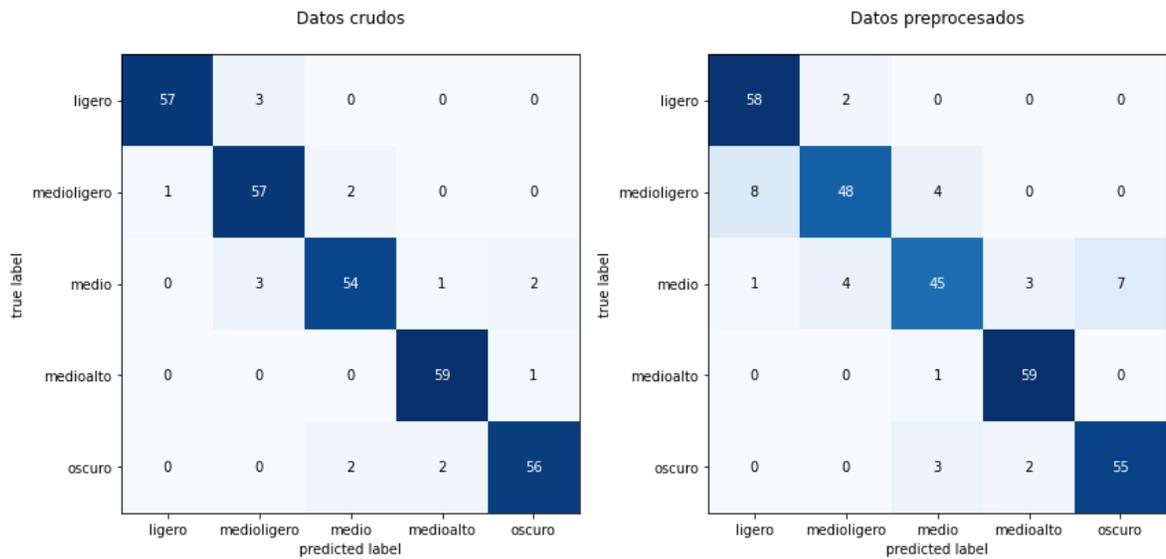


Figura 28. Matriz de confusión para Auto-sklearn 300 minutos. Fuente autor

Para el modelo construido a partir de los datos crudos, el grado de tostión de mejor rendimiento fue el Medio-Alto (f1-score=0.97), teniendo un total de 1 error, confundiéndose con el grado de tostión Oscuro. El grado de tostión de peor rendimiento fue el Medio (f1-score=0.92) con un total de 6 errores confundiéndose en 3 ocasiones con el grado Medio-Ligero, en 1 ocasión con el Medio-Alto y en 2 ocasiones con el grado Oscuro.

Para el modelo construido a partir de datos pre-procesados, el grado de tostión de mejor rendimiento fue el Medio-Alto (f1-score=0.95), teniendo un total de 1 error, confundiéndose con el grado de tostión Medio. El grado de tostión de peor rendimiento fue el Medio (f1-score=0.80) con un total de 15 errores confundiéndose en 7 ocasiones con el grado Oscuro, en 3 ocasiones con el Medio-Alto, en 4 ocasiones con el grado Medio-Ligero y en 1 ocasión con el grado Ligero.

El modelo de mejor rendimiento para el Auto sklearn 300 minutos fue el construido a partir de los datos crudos (accuracy =0.94), comparado con el modelo construido a partir de datos pre-procesados (accuracy =0.88).

5.5.6 Máquinas de soporte vectorial con sintonización fina

Para el modelo de máquinas de soporte vectorial (SVM) se usó el framework Scikit-learn, utilizando el modelo de mejor rendimiento para los algoritmos de Auto sklearn, que fue el modelo de 120 minutos. Solo los datos crudos se tuvieron en cuenta para la sintonización fina, debido a que fueron los que presentaron mejor rendimiento para todos los modelos anteriores.

Los hiperparámetros utilizados fueron los siguientes:

- kernel='rbf'
- C=68.608

En la Tabla 13, se presentan las métricas de rendimiento obtenidas por el modelo construido a partir del algoritmo SVM con sintonización fina. En la Figura 29, se presenta el rendimiento del modelo en la matriz de confusión.

Grado de tostión	recall	f1-score	Precisión
Ligero	0.97	0.97	0.97
Medio-Ligero	0.95	0.93	0.92
Medio	0.90	0.94	0.98
Medio-Alto	0.98	0.97	0.95
Oscuro	0.98	0.98	0.97

Accuracy Modelo SVM con sintonización fina	0.96
---	-------------

Tabla 13. Métricas de modelo SVM con sintonización fina. Fuente autor

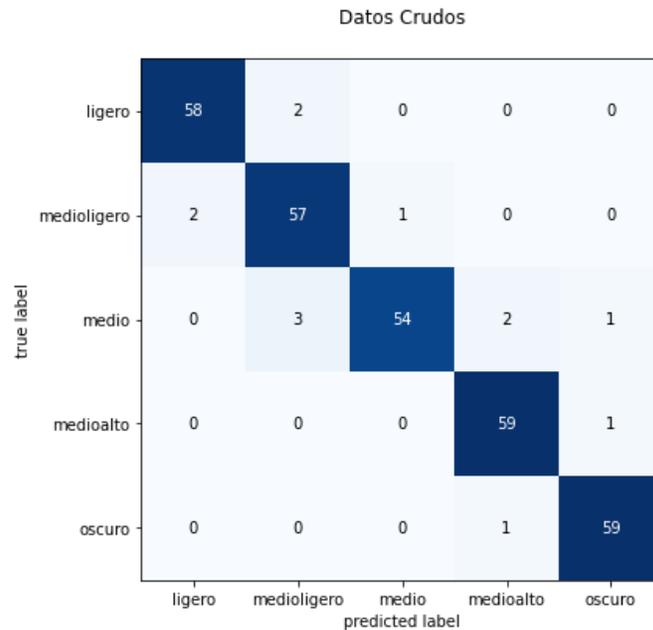


Figura 29. Matriz de confusión para SVM con sintonización fina. Fuente autor

Para este modelo el grado de tostión de mejor rendimiento fue el Oscuro (f1-score=0.98), teniendo un total de 1 error, confundiéndose con el grado de tostión Medio-Alto. El grado de tostión de peor rendimiento fue el Medio-Ligero (f1-score=0.93) con un total de 3 errores confundiéndose en 2 ocasiones con el grado Ligero, y en 1 ocasión con el grado Medio.

5.5.7 Comparación de los modelos

En la tabla 14, se presenta la comparación de los accuracy de los modelos tanto para datos crudos como pre-procesados.

Modelo	Accuracy datos crudos	Accuracy datos pre-procesados
Redes neuronales	0.72	0.71
Random forest	0.90	0.86
Máquinas de soporte vectorial	0.92	0.87
Auto-sklearn 120 minutos	0.95	0.86
Auto-sklearn 300 minutos	0.94	0.88
SVM con sintonización fina	0.96	-

Tabla 14. Comparación de modelos implementados. Fuente autor.

Los modelos entrenados con los datos crudos obtuvieron buenos resultados. Únicamente el modelo usando MLP obtuvo un accuracy menor a 0.90 (accuracy =0.72). Para los demás modelos se obtuvo un accuracy entre 0.92 y 0.96. Los modelos realizados con datos pre-procesados, a pesar de que obtuvieron accuracy entre 0.71 y 0.88, fueron ligeramente inferiores a los modelos entrenados con los datos crudos.

El modelo de mejor rendimiento fue el modelo SVM con sintonización fina, siendo el modelo con menor cantidad de falsos positivos (FP=13) y mayor cantidad de aciertos o verdaderos positivos (TP=287). También con el mayor accuracy de todos los modelos (accuracy=0.96), por lo que se hizo la elección de éste como modelo final.

En la Tabla 15, se presenta el desempeño de los modelos en relación a su capacidad de clasificar cada grado de tostión. Se muestran los grados de tostión con mejor y peor rendimiento para cada modelo empleado.

Modelo	Datos crudos				Datos pre-procesados			
	Mejor rendimiento		Peor rendimiento		Mejor rendimiento		Peor rendimiento	
	Grado de tostión	f1-score	Grado de tostión	f1-score	Grado de tostión	f1-score	Grado de tostión	f1-score
Redes neuronales	Medio-Alto	0.93	Medio-Ligero	0.57	Medio-Alto	0.91	Medio-Ligero	0.53
Random forest	Medio-Alto	0.98	Medio	0.82	Medio-Alto	0.97	Medio	0.75
SVM	Oscuro	0.98	Medio-Ligero	0.83	Medio-Alto	0.94	Medio	0.79
Auto sklearn 120 minutos	Ligero	0.98	Medio	0.92	Medio-Alto	0.94	Medio-Ligero	0.75
Auto sklearn 300 minutos	Medio-Alto	0.97	Medio	0.92	Medio-Alto	0.95	Medio	0.80
SVM con sintonización fina	Oscuro	0.98	Medio-Ligero	0.93	-	-	-	-

Tabla 15. Desempeño individual de cada grado de tostión. Fuente autor.

El grado de tostión que mejor desempeño individual tuvo, fue el Medio-Alto, siendo el de mejor f1-score, para los modelos entrenados con los datos crudos y pre-procesados. Este grado de tostión es particularmente especial considerando, como se menciona en Marín, et al. (2017), que la alta tostión hace parte de los 5 segmentos principales que agrupa los cafés especiales de la Asociación Americana de Cafés Especiales (SCAA). Además, para la región del Sur-occidente supone también especial importancia, considerando los programas de cafés especiales como Café Nespresso AAA (Comité de Cafeteros del Cauca, 2014), donde se resalta este mismo segmento como uno de los principales segmentos de cafés especiales.

El peor desempeño individual para los grados de tostión, de los modelos entrenados con los datos crudos y pre-procesados, lo obtuvieron el grado de tostión Medio y Medio-Ligero.

5.6 PUESTA EN PRODUCCIÓN EN SERVIDOR LOCAL

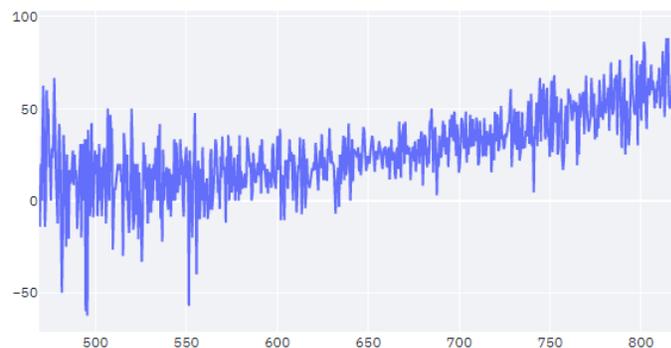
Con el objetivo de hacer accesible el modelo de machine learning al consumidor se montó en servidor local con el framework Streamlit y el modelo SVM con sintonización fina. Se realizó una interfaz gráfica de usuario para garantizar mayor comodidad en el consumo del modelo, ver Figura 30.

SISTEMA DE PREDICCIÓN DEL GRADO DE TOSTIÓN DE CAFE MOLIDO

ingrese la direccion del archivo:

D:\tesis\espectros individuales\ligero\lg1 (1).txt

Predicción :



EL GRADO DE TOSTIÓN ES: Ligero

Figura 30. interfaz con Streamlit. Fuente autor

El aplicativo desplegado en el servidor permite al usuario cargar una huella espectral de datos crudos y obtener la predicción sobre el grado de tostión más probable del café tostado relacionado con esa firma espectral. El sistema internamente realiza la inferencia usando el modelo SVM con sintonización fina entrenado y presentado en la sección anterior. Teniendo en cuenta la necesidad creciente de métodos para medir los rasgos de la calidad del café de forma objetiva, la puesta en producción del modelo aquí presentado es especialmente relevante, pues cualquier persona que cuente con un espectrómetro óptico de características similares a las del usado en este estudio, tiene la facilidad de solo capturando el espectro tener la estimación del grado de tostión de su muestra de café. Para utilizar la interfaz basta con copiar

la dirección del archivo en la caja de texto y presionar el botón “Predicción”, de esta manera se obtiene como resultado la predicción acompañada de su gráfica.

Los hallazgos presentados en este trabajo de investigación muestran que la reflectancia de la luz en el rango VIS-NIR (huellas espectrales) con muestras de café tostado, y el uso de técnicas de Machine Learning, son una herramienta valiosa para la estimación del grado de tosti3n. Considerando la importancia de los sistemas end to end (e2e), en este trabajo se abord3 la adquisici3n de datos, su pre-procesamiento, procesamiento, ajuste de modelos de IA, sintonizaci3n autom3tica, sintonizaci3n fina, evaluaci3n de modelos de IA y puesta en producci3n en servidor local. As3 entonces, se ha propuesto una soluci3n tecnol3gica integral que potencialmente puede impactar los procesos productivos de la regi3n mediante un proceso de transferencia tecnol3gica, que, por el momento, est3 fuera del alcance de los objetivos de esta investigaci3n, pero que se considera viable a corto plazo.

CONCLUSIONES

En este trabajo de investigación se desarrolló un sistema de clasificación para el grado de tuestión de café molido a partir de huellas espectrales en el rango de 400 nm a 800 nm de manera satisfactoria con resultados de accuracy entre (0.71 y 0.96) que demuestran la idoneidad de este método como sistema de clasificación. Las huellas espectrales del café tostado contienen información que permitieron a los sistemas de IA estimar el grado de tuestión en condiciones de iluminación controladas.

En el proceso de entrenamiento de los modelos de clasificación basados en machine learning se determinó, que los modelos entrenados a partir de los datos crudos fueron los modelos de mejor rendimiento, esto debido a que los modelos entrenados con los datos sometidos a preprocesamiento modifican el espectro original desfavoreciendo el entrenamiento. El modelo de mejor desempeño fue la SVM con sintonización fina, dando como resultado un sistema de clasificación con un Accuracy de 0.96. Otro modelo destacado con Accuracy por encima de 0.9 fue el Random forest, demostrando la capacidad que tienen los sistemas de clasificación basados en machine learning para predecir el grado de tuestión de café molido. El grado de tuestión que mejor desempeño obtuvo en la mayoría de los sistemas de clasificación fue el medio alto, resultado importante, dada la relación de este grado de tuestión con los programas de cafés especiales del Cauca, pues la tuestión alta es uno de los segmentos importantes de los cafés especiales.

Se pudo evidenciar la importancia de la importancia de automl en el desarrollo del trabajo, dando la posibilidad de evaluar múltiples sistemas de clasificación a la vez, y seleccionar el más idóneo para clasificar café tostado molido, también dando la posibilidad de conocer los parámetros más determinantes para cada modelo, permitiendo minimizar los tiempos de producción de sistemas de clasificación.

El modelo final fue puesto en producción en servidor local con el framework streamlit, parte muy importante de este trabajo, pues permite que el modelo pueda llegar a un usuario final con una interfaz sencilla, y permitiendo a cualquier persona que cuente con un equipo para la captura de espectros compatible con las características del modelo, evaluar de manera satisfactoria el grado de tuestión del café molido.

TRABAJOS FUTUROS

Para trabajos futuros se sugiere incluir experimentos con más grados de tuestión, donde se pueda trabajar con los ocho grados establecidos por la Asociación Americana de Cafés Especiales (SCAA), abarcando así el rango completo de clasificación y consolidando un sistema de para la estimación de grado de tuestión completo.

Un aspecto muy importante a tener en cuenta en trabajos futuros, es la inclusión de otras variables, como el tipo de café y su procedencia, permitiendo hacer el sistema de clasificación más robusto.

En la producción como trabajo futuro se sugiere la implementación del modelo no solo en servidor local si no también implementación de forma remota, con una aplicación que permita a cualquier persona que cuente con los equipos indicados y acceso a internet hacer uso de las bondades del aplicativo.

REFERENCIAS

- Aparicio, E. (2017). Técnicas colorimétricas. visión criminológica-criminalística.
- Parra, F. (2019). Estadística y Machine Learning con R. EAE.
- Yergenson, N., & Aston, D. E. (2019). Monitoring coffee roasting cracks and predicting with in situ. Food Process Engineering.
- Alessandrini, L., Romani, S., Pinnavaia, G., & DallaRosa, M. (2008). Near infrared spectroscopy: An analytical tool to predict coffee roasting degree. Analytica Chimica Acta, 95-102.
- aquateknica. (28 de Julio de 2020). www.aquateknica.com. Obtenido de <https://www.aquateknica.com/product/cr-410c-colorimetro-medir-color-tostado-cafe/>
- Azam , S. (2020). Estimation of Iron using Multiple Linear Regression Models. researchgate.
- Bass, M. (1994). Handbook of Optics: Devices, Measurements, and Properties, Volume II, Second Editio. Arizona.
- Bender , A., & Nicolet, S. (2020). Evaluación Comparativa de Herramientas AutoML. ASAI, Simposio Argentino de Inteligencia Artificial.
- Bertonea, A., Venturelloa, A., Giraudoa, G., Pellegrino, b., & Geo, b. (2016). Simultaneous determination by NIR spectroscopy of the roasting degree and Arabica/Robusta ratio in roasted and ground coffee. Elsevier, 683-689.
- Bolek, S., & Ozdemir, M. (2017). Optimization of roasting conditions of microwave roasted Pistacia. LWT, 327-336.
- Borja , R., Monleón , A., & Rodellar , J. (2020). Estandarización de métricas de rendimiento para clasiñadores Machine y Deep Learning. Iberian Journal of Information Systems and Technologie.
- Breiman, L. (2001). Random Forests. Kluwer Academic Publishers. Manufactured in The Netherlands.
- Caldentey, P. (2017). utilización de sensores multiespectrales e.
- Campo, D., Benitez, O., & Caicedo, M. (2018). Herramientas de CV para evaluar el color y matiz del café tostado: El color del café tostado y su relación con las propiedades organolépticas. Editorial Académica Española.
- Chernov, V., Alander, J., & Bochko, V. (2015). Integer-based accurate conversion between RGB and HSV color spaces. Computer & Electrical Engineering, Pages 328-337.
- Choudhury, R. (2015). Metamerism and shade sorting. Principles of Colour and Appearance Measurement, 174-213.
- Comité de Cafeteros del Cauca. (2014). Comité departamental de cafeteros informe 2014. Cauca.
- Diaz, F., Omarza, A., & Rojano, B. (2018). Efecto de la Tostión del Café (Coffea arabica L. var. Castillo) sobre el Perfil de Taza, Contenido de Compuestos Antioxidantes y la Actividad Antioxidante. Scielo.
- Drake, F. (2000). Guía de aprendizaje de Python.

- Fiore, A., Romaniello, R., Severini, C., & Peri, G. (2006). Study of Physical Properties of Coffee Beans during Roasting. Application of Hyperspectral Image Analysis.
- Garcia , Y., Caballero , L., & Maldonado , Y. (2016). Evaluación del color en el tostado de haba . ciencia y tecnología alimentaria .
- Hastie, T., Tibshirani, R., & Friedman, J. (2008). The Elements of Statistical Learning. Stanford, California: Springer.
- Industrias quantik, s.l. (2021). industrias quantik, S.L. Obtenido de <https://1946-co.all.biz/colormetro-g7385>
- Jean, S., Yves, T., & Jules, D. (1972). Suavisado y diferenciación de datos mediante un procedimiento simplificado de minimos cuadrados . Analytical chemical.
- Jimenez , L. (2010). al interior de una máquina de soporte vectorial. revista de ciencias.
- Jimenez , T., Correa, E., & Diezma, B. (2011). un buen café: una simbiosis de color y sabor.
- Magunabe, E., Mabaso, M., Muthwa, S., Kruger , H., & Mdluli, P. (2019). Optimization of CIEL*a*b*/Yxy colour system for colorimetric devices fabricated with gold nanoparticles. Journal of Molecular Structure, 271-277.
- Marín Peláez, N. I., & Vasco Orozco, A. (2017). La tosti3n como valor agregado en los caf3s especiales. Revista de investigaci3n INGEAM.
- Martinez, G., & Mesa, M. (2019). Automatic Classifier of blood sample images based on deep neural networks. Ingeniería Electrónica, Automática y Comunicaciones.
- Medina, R., & Nique , C. (2017). Bosques aleatorios como extensi3n de los árboles de.
- MlcaSense. (2021). support.micasense.com. Obtenido de <https://support.micasense.com/hc/en-us/articles/115000765514-Use-of-Calibrated-Reflectance-Panels-For-RedEdge-D>
- Montesinos, R. (2003). Especificacion Cromatica de gamas de colores usadas en la industria de calzado . universidad de alicante .
- Nakilcioglu, E., & Ötleş, S. (2019). Physical characterization of Arabica ground coffee with different roasting degrees. aabc journal.
- Ocampo, L., & Álvarez, M. (2017). Tendencia de la producci3n y el consumo. oceaninsight. (2021). Obtenido de <https://www.oceaninsight.com/products/spectrometers/microspectrometer/sts-series/sts-vis>
- OIC, O. i. (2015). Fortaleciendo el sector.
- Pasquini, C. (2003). Near Infrared Spectroscopy: Fundamentals, Practical Aspects and Analytical Applications. Revista de la Sociedad Brasileña de Química.
- Pizarro, C., Isabel , E., Gonzales, J., & Forina, M. (2007). Use of Near-Infrared Spectroscopy and Feature Selection Techniques for Predicting the Caffeine Content and Roasting Color in Roasted Coffees. Journal of agricultural and food chemistry.
- Porras, C., Vargas , G., Araúz, L., & Abarca, Y. (2019). Efecto de la temperatura en la rapidez del tostado de café. Tecnología en Marcha.

- Quintero, M., & Rosales, M. (2014). El mercado mundial del café: Visión General.
- Samid, D., Alves, S., Groenner, B., Meira, F., & Fonseca, R. (2019). Recognition of coffee roasting degree using a computer vision system. Elsevier, 312-317.
- Sanchez, N. (2015). Máquinas de soporte vectorial y redes neuronales artificiales en la predicción del movimiento usd/cop spot intradiario.
- Santos, P. (2009). Espectrofotómetro: el ojo electrónico.
- Santos, R., Viegas, O., Páscoa, R., Ferreira, I., Rangel, A., & Lopes, J. (2016). In-line monitoring of the coffee roasting process with near infrared spectroscopy: Measurement of sucrose and colour. Food Chemistry, 103-110.
- Singh, P. (2021). Deploy Machine Learning Models to Production. Karnataka: APRESS.
- SOLIDWORKS® (2021). solidworks. Obtenido de <https://www.solidworks.com/es/domain/design-engineering>
- streamlit.io. (11 de septiembre de 2021). docs.streamlit.io/en/stable/. Obtenido de <https://docs.streamlit.io/en/stable/>
- Suzana, L., Fernandez, D., De Souza, A., Da-Wen, S., & Yoko, E. (2014). Application of infrared spectral techniques on quality and compositional attributes of coffee: An overview. Food Research International, 23-32.
- Swisscontact. (2016). swisscontact.org/. Obtenido de https://www.swisscontact.org/fileadmin/user_upload/COUNTRIES/Ecuador/Documents/Content/ManualTuesteCafe.pdf
- Tolessa, K., Rademaker, M., De Baets, B., & Boeckx, P. (2016). Prediction of specialty coffee cup quality based on near infrared spectra of green coffee beans. Talanta, 367-374.
- Torres, J. (2020). Introducción práctica con keras y TensorFlow 2.
- UNCTAD/WTO. (17 de Julio de 2020). [laguiadelcafe.org](http://www.laguiadelcafe.org). Obtenido de <http://www.laguiadelcafe.org/guia-del-cafe/calidad-del-cafe/Medicion-del-color-del-cafe-tostado/>
- Virgen, L., Herrera, E., Corona, R., Arriola, E., & Guatemala, G. (2016). Neuro-fuzzy model based on digital images for the monitoring of coffee bean color during roasting in a spouted bed. Expert Systems with Applications, 162-169.
- Viscarra, R. (2007). ParLeS: Software for chemometric analysis of spectroscopic data. hemometrics and Intelligent Laboratory Systems.
- Walsh, K., Blasco, J., Zude, M., & Sun, X. (2020). Visible-NIR 'point' spectroscopy in postharvest fruit and vegetable assessment. Postharvest Biology and Technology.
- Windig, W., Shaver, J., & Bro, R. (2008). Loopy MSC: A Simple Way to Improve Multiplicative Scatter.