

# **CAPITULO 5:**

## **MEDIDAS CON MANZANAS**

### **5.1 INTRODUCCIÓN**

En los capítulos 5, 6 y 7 se discuten los resultados obtenidos con las variedades de fruta que se han estudiado en este trabajo. Todas ellas (manzanas, peras, melocotones y nectarinas) son frutas climatéricas caracterizadas por una producción creciente de etileno y otros componentes aromáticos a medida que su maduración avanza. Dicha producción alcanza un máximo y después decrece con la aparición de la senescencia. De entre todas las variedades climatéricas se escogieron estas cuatro debido a su disponibilidad, a su interés comercial y al hecho de que se producen en zonas relativamente cercanas a nuestro laboratorio.

Las cuatro variedades escogidas han sido estudiadas con los dos sistemas de olfato electrónico diseñados a lo largo de este proyecto. Así, en una primera temporada se hicieron estudios de viabilidad con el prototipo inicial, mientras que en el segundo año se realizaron experimentos con objetivos concretos. Por este motivo, la estructura de los capítulos de resultados ha sido organizada de forma similar, con un primer apartado que se ocupa de las experiencias iniciales y otro que detalla los resultados obtenidos con el segundo prototipo. En [5.1] se pueden consultar los resultados obtenidos la primera temporada, mientras que en [5.2-4] se detallan los experimentos realizados con el prototipo de flujo continuo.

La metodología que se ha seguido en cada temporada es muy similar para todas las variedades de fruta estudiadas, de manera que la descripción experimental que se realiza en este capítulo sirve para ilustrar los estudios realizados con el resto de variedades que se explicarán en los capítulos 6 y 7.

## **5.2 ESTUDIO DE VIABILIDAD**

### **5.2.1 Objetivos**

El objetivo primordial del estudio preliminar con manzanas era comprobar si una nariz electrónica podía identificar el estado de maduración de las manzanas a lo largo de su proceso de maduración en condiciones ambientales (maduración de “shelf life”). Para ello es imprescindible que la concentración de volátiles de la fruta provoque en la matriz de sensores una respuesta que evolucione medida que avanza el estado de maduración de las muestras medidas con el instrumento.

Aplicando técnicas de reconocimiento de patrones se intentará clasificar la fruta entre tres estados de maduración: verde, madura y sobremadura. Es importante resaltar que en el estudio preliminar las mediciones destructivas se realizaron para orientar al operario en su decisión sobre como clasificar la fruta tras las medidas con nariz electrónica. Por lo tanto, la decisión última sobre si la fruta esta verde, madura o sobremadura corresponde, en este estudio preliminar, a un criterio subjetivo apoyado en técnicas destructivas como la firmeza, acidez y sólidos solubles.

Además, teniendo en cuenta que en la aplicación de redes neuronales existe una fase de aprendizaje y otra de evaluación, y que en la de aprendizaje se consideran salidas ideales a las clasificaciones hechas por el operario, es necesario aclarar que el índice de aciertos en la clasificación nos indica el grado de coincidencia entre la clasificación hecha por la nariz electrónica y el operario, y no el grado de acierto sobre el estado exacto de maduración de la fruta. Esta limitación es inevitable ya que,



La figura 5.1 esquematiza la metodología experimental que se diseñó para poder realizar el seguimiento del proceso de maduración con técnicas destructivas y con la nariz electrónica de forma paralela. Este proceso se utilizó en todas las variedades de fruta medidas con el primer prototipo.

La base del método radica en saber emparejar correctamente las piezas de un grupo de medida, de forma que cada pareja esté formada por dos piezas de tamaño, color y tacto muy parecidos para poder afirmar que su estado de maduración es similar. Así, en el caso de las manzanas Golden, se formaron 7 parejas para cada uno de los cuatro grupos de fruta recolectada.

Una vez las piezas han sido emparejadas, se forman dos subgrupos, el de medida y el de reserva, de forma que de cada pareja una pieza se destina al subgrupo de medida y otra al de reserva. La primera medida con el sistema de olfato electrónico se realiza con el subgrupo de medida. Tras finalizar las medidas con nariz electrónica, se escoge una pieza al azar de dicho subgrupo y se aplican sobre ella mediciones destructivas.

Finalmente, se coge su pareja (que estaba en el grupo de reserva) y se incorpora al grupo de medida, de manera que el nuevo grupo de medida sigue teniendo el mismo número de piezas y la destruida queda substituida por una muestra con un estado de maduración similar.

Con las manzanas Golden se realizaron, salvo fines de semana u otros imprevistos, dos medidas diarias con la nariz electrónica. Primero se midieron los grupos 1 y 2 (desde el 24 de setiembre hasta el 19 de octubre) y posteriormente los grupos 3 y 4 que se habían conservado en la nevera (desde el 26 de octubre hasta el 12 de noviembre). En cada medida se pesaba todo el grupo y se obtenía el perímetro medio de las piezas para tener información con la que los algoritmos de reconocimiento de patrones pudiesen realizar operaciones de normalización. Además, las medidas sucesivas con nariz electrónica se espaciaron una hora para dar tiempo a los sensores a recuperar su estado inicial. La tabla 5.1 muestra el número total de medidas que se hicieron para cada grupo.

Grupo	Número de medidas
1	13
2	13
3	11
4	11

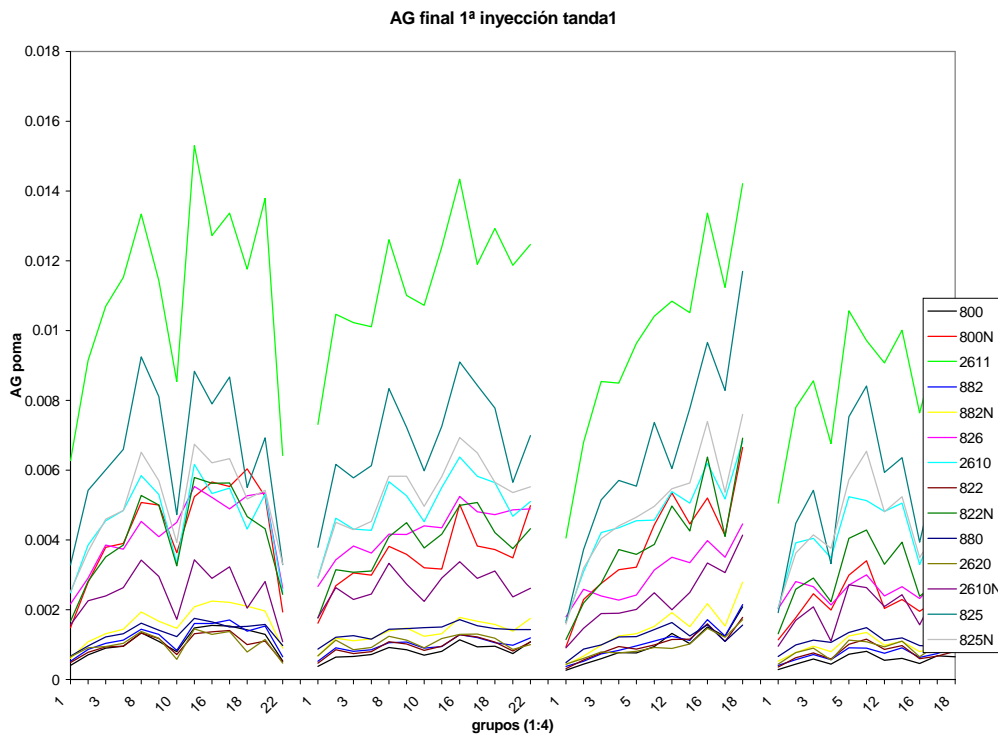
*Tabla 5.1: Número de medidas para cada grupo*

Las técnicas destructivas aplicadas a las manzanas en este estudio preliminar incluyeron medidas de firmeza, de acidez y de sólidos solubles. Para poder monitorizar el proceso de maduración durante el “shelf life” de la fruta (maduración a 20° y humedad relativa ambiente) por un período de unos 20 días, las medidas destructivas se practicaron aproximadamente cada tres días. Solo en estas jornadas se realizó la sustitución de la muestra destruida por su pareja de reserva.

### **5.2.3 Evolución de la señal**

Los sensores incluidos en la nariz son los que se incluyeron en el primer prototipo, sensores ya descritos en el capítulo 3. Lo primero que se hizo fue determinar el tiempo de concentración y el número de inyecciones necesarias para provocar una respuesta adecuada en la matriz de sensores del equipo. Tras varias pruebas, se estableció que las piezas debían permanecer en la cámara de concentración una hora, y que una sola inyección de 50 ml de muestra de la atmósfera de la cámara de concentración era suficiente para generar una señal clara.

Como la respuesta de los sensores era suficientemente clara, lo importante era comprobar si la evolución de la señal permitiría seguir el proceso de maduración de las muestras. La figura 5.2 muestra la evolución de cada uno de los cuatro grupos de manzanas a los que se siguió el proceso de maduración con el primer prototipo. El eje horizontal representa los días transcurridos desde el inicio del shelf life, mientras que el vertical representa el incremento de conductancia tras la inyección de la muestra de atmósfera de la cámara de concentración.



**Figura 5.2:** Evolución de la señal para los 4 grupos de manzanas

En la figura se puede observar, en líneas generales, que existe una cierta tendencia a aumentar el valor del incremento de conductancia ( $\Delta G$ ) a medida que pasan los días de “shelf life”. De todas maneras, esta tendencia es poco clara salvo para el grupo 3. De hecho, la poca repetitividad de los sensores junto a la variabilidad inherente a las piezas de fruta hace que el “rizado” entre medidas sea de una amplitud claramente superior a la evolución que se pueda derivar de la señal.

Por otro lado, también se observa que prácticamente todos los sensores siguen una tendencia similar y en lo único que se diferencian es en la sensibilidad que muestran ante los volátiles generados por la fruta.

#### 5.2.4 Resultados

La figura 5.2 ya nos permite intuir que los resultados no van a ser muy prometedores ya que, aunque se observa una cierta tendencia, también se ve que la variabilidad en las mediciones supera con creces este comportamiento. Una primera aproximación

consistió en plasmar en un diagrama PCA las 48 medidas y observar si en alguna de las dos primeras componentes principales se observaba alguna tendencia a destacar. La figura 5.3 muestra dicho diagrama en el que cada medida ha sido etiquetada con su número de orden. Cada color representa un grupo diferente, siendo el grupo 1 de color rojo, el grupo 2 de color azul, el 3 de color añil y el cuatro de color amarillo.

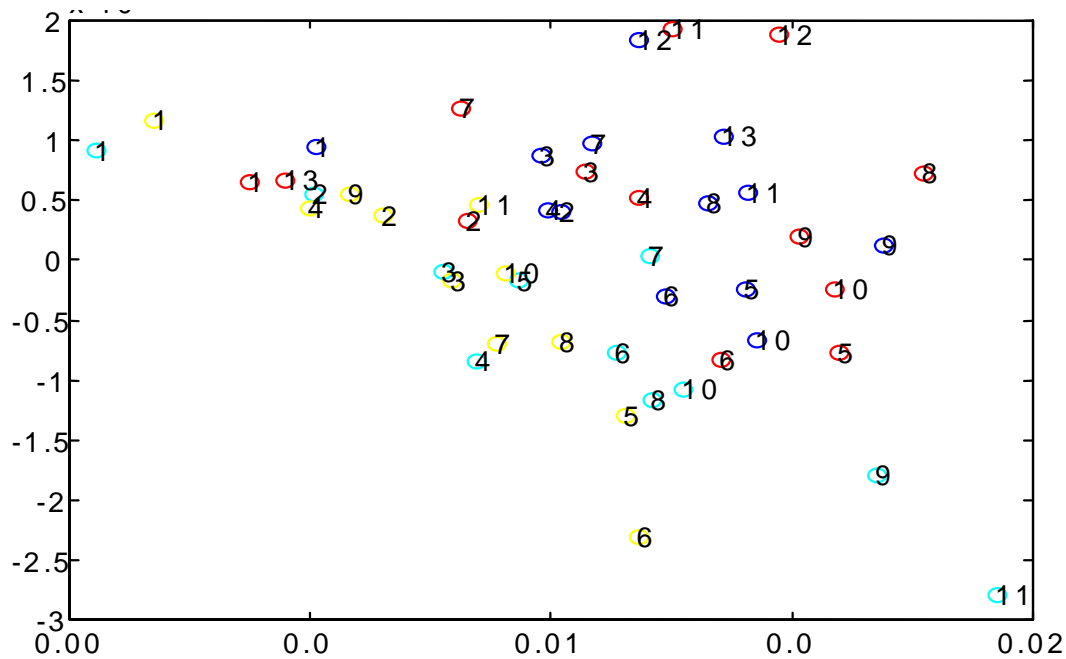


Figura 5.3: Diagrama PCA de las dos primeras componentes principales de los 4 grupos de manzanas (PC1 eje horizontal, PC2 eje vertical).

Los datos de entrada para realizar el PCA fueron el incremento de conductancia de todos los sensores. En esta figura no se pueden deducir ningún tipo de comportamiento respecto a las dos primeras componentes principales, lo que permite intuir que los resultados de clasificación no serán excesivamente buenos.

Para comprobar si era posible realizar una clasificación del estado de maduración de las piezas se utilizó una red neuronal. El objetivo era clasificar cada una de las medidas como fruta verde, madura o sobremadura.

Como se puede observar en la figura 5.4, la red utilizada es de tipo “feed-forward” con una capa oculta. Las entradas son las combinaciones de diferentes parámetros de los

sensores, mientras que la salida ideal es una codificación “uno a tres” en la que la clasificación correcta se denota por un uno y las dos clases inactivas por un cero. Así, por ejemplo, una salida ideal “0-1-0” indicaría que la clasificación correcta para esa medida sería manzanas “maduras”.

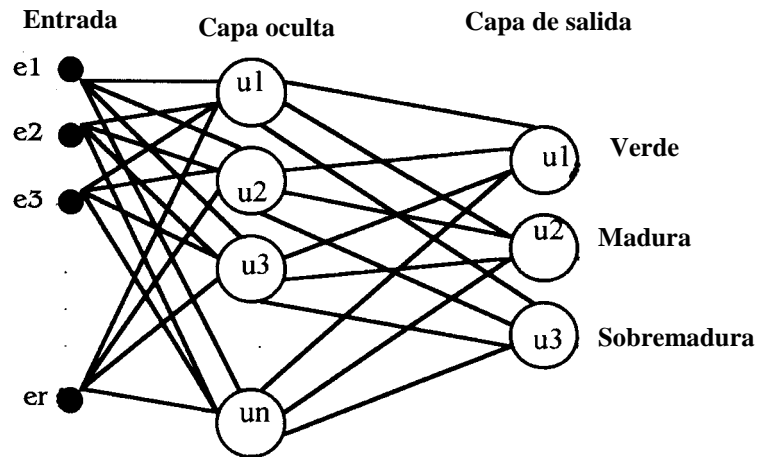


Figura 5.4: Estructura de la red neuronal para clasificar manzanas

Como se ha comentado previamente, toda red neuronal requiere de una fase de entreno y otra de evaluación. En nuestro caso se utilizó una aproximación cruzada de orden 4 para evaluar la eficacia del método. En concreto, al tener cuatro grupos diferentes de manzanas, se iteró cuatro veces el proceso de entreno y evaluación. En cada una de las iteraciones, se entrenó con tres grupos y se evaluó con el cuarto. Esta aproximación se utilizó descartando la validación cruzada de orden uno (el método “leave-one-out”) por dos razones:

- Por un lado, el entreno de una red neuronal es un proceso computacionalmente costoso, por lo que una validación cruzada de orden uno exigiría la repetición del aprendizaje 48 veces, ya que tenemos un conjunto de 48 medidas con nariz electrónica. Esto impediría probar diferentes combinaciones de entradas, número de neuronas en la capa oculta, etc., dado que el tiempo de computación necesario para cubrir todo el abanico de posibilidades sería prohibitivo.
- En segundo lugar, la utilización de grupos de fruta diferentes para el proceso de entrenamiento y evaluación permite comprobar el comportamiento del prototipo



ante una situación más realista en la que el entrenamiento y la evaluación se hacen con fruta totalmente diferente. De utilizarse un “leave-one-out”, al evaluar la medida  $n$  (que corresponde a uno de los cuatro grupos) se entrena con el resto de medidas, entre las que se incluyen las medidas realizadas con las piezas del mismo grupo días antes y después a la medida  $n$ .

La tabla 5.2 muestra los resultados obtenidos para las mejores combinaciones de parámetros y para diferente número de neuronas en la capa oculta. En ella se han utilizado las 48 medidas disponibles, que corresponden a 4 grupos diferentes de manzanas. Como se puede observar, en las mejores combinaciones se utiliza el parámetro incremento de conductancia ( $\Delta G$ ) de un número reducido de sensores. Los sensores se han escogido aplicando el criterio de sensibilidad descrito en el capítulo 4.

Como se puede comprobar en la tabla, los parámetros de peso ( $p$ ) y superficie media ( $s$ ) de las piezas están presentes en todas las combinaciones con un índice de aciertos elevado. Esto se explica por su utilización como señales de normalización. Hay que tener en cuenta que piezas de fruta más verdes pero con un gran tamaño pueden generar la misma cantidad de volátiles que piezas más pequeñas en un estado de maduración más avanzado. El peso es, por lo tanto, un parámetro de normalización a tener en cuenta. Asimismo, la superficie media de las piezas (calculadas a partir del perímetro medio) es un dato importante si se quieren normalizar correctamente los aromas emitidos.

Como la mayoría de los sensores tiene un comportamiento similar (aunque a diferentes escalas), tal y como se dedujo de la figura 5.2, no es de extrañar que el mejor resultado corresponda a la utilización de un solo sensor (en este caso el 2610), aunque la combinación de dos sensores (2610 y 800N) da resultados muy parecidos. Debido a la variabilidad tanto de los sensores como de la fruta, así como de la subjetividad del operario, estos resultados no deben ser interpretados de forma categórica, si no más bien como un estudio indicativo.

Entre las conclusiones que se pueden extraer destaca el hecho de que, aproximadamente, el sistema está de acuerdo con el operario en 3 de cada 4 casos (73%), mientras que si la clasificación de las muestras en tres clases se realizase de forma aleatoria los aciertos se reducirían a un 33%, estadísticamente hablando. Por otro lado, se observa que con pocos sensores se obtienen buenos resultados y que las señales de normalización ayudan considerablemente a incrementar el grado de éxito en la clasificación, ya que como se observa en la tabla resumen, en las mejores combinaciones siempre aparecen el peso y superficie como parámetros incluidos. En el capítulo 7, al medir melocotones, se presenta un estudio comparativo en el que queda patente la importancia de estas dos señales.

Variables	n° sensores	Sensores	N° inputs	Neuronas ocultas	Aciertos/ Medidas	% ok
Go,G1,p,s	4	800N, 2610, 825, 825N	10	6	33/48	68.75
$\Delta$ G1,p,s	4	800N, 2610, 825, 825N	6	2,4,6	32,32,33/48	68.75
$\Delta$ G1,p,s	1	2610	3	2,4,6	34,33,35/48	<u>72.91</u>
$\Delta$ G1,p,s	2	800N,2610	4	2,4,6	33,33,34/48	70.8
$\Delta$ G1,p,s	2	800N,825	4	2,4,6	33,34,30/48	70.8
$\Delta$ G1,p,s	2	800N,825N	4	2,4,6	32,33,32/48	68.75
$\Delta$ G1,p,s	2	2610,825	4	2,4,6	32,30,32/48	66.6
$\Delta$ G1,p,s	2	2610,825N	4	2,4,6	32,32,34/48	70.8

Tabla 5.2: Resultados de clasificación con redes neuronales para manzanas

En este proceso de clasificación cruzada se han utilizado los cuatro grupos de manzanas recolectados. Sin embargo, dos de ellos fueron almacenados en un frigorífico y, por lo tanto, los grupos 1 y 2 pueden haber madurado de forma diferente a los grupos 3 y 4. De hecho, la evolución de los valores de firmeza muestra diferencias importantes entre las muestras medidas inmediatamente después de la recolecta y las almacenadas un mes en el frigorífico. Por ese motivo, para ver si se obtenían mejores resultados, se realizó una validación cruzada utilizando sólo los grupos que no pasaron por frigorífico (1 y 2).

La tabla 5.3 muestra los resultados en los que se puede observar que se utilizaron un total de 26 medidas, con dos iteraciones, de forma que en la primera se utilizó el grupo

1 como conjunto de entrenamiento y el grupo dos como grupo de evaluación, mientras que en la segunda iteración cambiaron los papeles.

Variables	n° sensores	Sensores	n° inputs	Neuronas ocultas	aciertos/medidas	% ok
Go,G1,p,s	4	800N, 2610, 825, 825N	10	6	14/26	53.8
AG1,p,s	4	800N, 2610, 825, 825N	6	2,4,6	12,12,13/26	50
AG1,p,s	1	2610	3	2,4,6	13,16,13/26	<u>61.53</u>
AG1,p,s	2	800N,2610	4	2,4,6	14,13,12/26	53.84
AG1,p,s	2	800N,825	4	2,4,6	16,14,11/26	<u>61.53</u>
AG1,p,s	2	800N,825N	4	2,4,6	15,13,13/26	57.7
AG1,p,s	2	2610,825	4	2,4,6	16,14,15/26	<u>61.53</u>
AG1,p,s	2	2610,825N	4	2,4,6	16,13,14/26	<u>61.53</u>

Tabla 5.3: Resultados de clasificación con los grupos 1 y 2

Como se puede ver, los resultados no mejoran respecto al estudio anterior. Esto puede ser debido a dos razones. En primer lugar, el número de medidas de entrenamiento baja drásticamente (se reduce a 13 frente a un mínimo de 35 en el caso anterior). Por otro lado, aunque el ritmo de maduración de los grupos 3 y 4 hayan sido diferentes eso ya ha sido tenido en cuenta por el operario, que asignó más medidas verdes y menos medidas sobremaduras a estos grupos ya que dicha clasificación no se hacía por días de “shelflife” sino por color, apariencia y por los parámetros destructivos aplicados.

### 5.2.5 Conclusiones

Con estos estudios preliminares sobre manzanas se puede concluir que, aunque los volátiles generados por las manzanas son detectados fácilmente por los sensores del prototipo, el proceso de maduración se traduce en una señal cuya tendencia es débil frente a otras interferencias como son la falta de repetitividad de los sensores o la variabilidad de las piezas de fruta.

Por ese motivo era fácil prever que un análisis PCA fracasaría en el intento de agrupar las piezas en función de su grado de maduración, ya que, al ser un método no supervisado, busca las direcciones de máxima varianza independientemente del tipo de información que aporten. Como la variabilidad de las muestras y la escasa repetitividad de la respuesta de los sensores aportan mucha mayor varianza que la débil tendencia del proceso de maduración, las componentes principales no reflejan la evolución de dicho proceso.

Por otro lado, un algoritmo de aprendizaje supervisado como una red neuronal es capaz de, al menos en parte, extraer la tendencia subyacente en el proceso y filtrar las interferencias debidas a sensores y fruta. Es por ese motivo que los resultados de clasificación son bastante más buenos de lo que cabría esperar con las tendencias mostradas en la figura 5.1.

En definitiva, el primer prototipo es capaz de detectar los volátiles que emiten las manzanas durante el proceso de maduración y realizar un seguimiento de dicho proceso con ciertas dificultades. Los algoritmos de reconocimiento de patrones que pueden explotar con éxito las señales obtenidas con el equipo deben ser instruidos a distinguir entre información (varianza) que debe ser eliminada e información relevante para clasificar correctamente la fruta, por lo que, a priori, siempre tendrán más éxito los algoritmos de aprendizaje supervisado como las redes neuronales backpropagation.

## **5.3 MEDIDAS EN FLUJO CONTINUO**

### **5.3.1 Objetivos**

Los objetivos planteados para la segunda temporada de mediciones con manzanas fueron múltiples y se centraron tanto en probar el prototipo de flujo continuo como en completar el estudio preliminar en aquellos aspectos que limitaban la validez de los resultados, como la falta de objetividad en la determinación del estado de maduración de la fruta.

Al mismo tiempo, ya que se iban a utilizar técnicas clásicas de control de calidad de forma sistemática, se creyó interesante estudiar el proceso de maduración de un tipo de manzana poco estudiada y de gran valor comercial, como es la variedad de manzana denominada “pinklady”.

En concreto, los aspectos que se trataron con detalle en este estudio fueron el seguimiento del proceso de maduración en función de los días de shelf-life, la relación existente entre las señales de los sensores y los parámetros destructivos y las derivas que experimentan los sensores durante el intervalo temporal del estudio.

### 5.3.2 Metodología experimental

Como se ha comentado, se utilizaron manzanas Pinklady para el estudio. 200 muestras fueron cosechadas en una finca de la provincia de Lleida en la fecha óptima de recolecta según profesionales del sector. Se formaron cuatro grupos cogiendo seis manzanas para cada uno de forma aleatoria. Las muestras sobrantes (176 en total) se reservaron para ir substituyendo a las piezas destruidas al aplicar técnicas clásicas de medida de calidad.

En cada sesión, el sistema de olfato electrónico mide de forma separada los cuatro grupos de manzanas. Al final de la jornada, se escogían al azar nueve manzanas (1 del grupo 2, 2 del grupo 3 y las 6 del grupo 4) para realizar medidas de calidad. Cada una de las piezas destruidas se substituía por otra con un color, peso y tamaño similares de las restantes piezas recolectadas. Las piezas del grupo 1 fueron la excepción al ser las mismas durante toda la experiencia.

Las medidas se prolongaron desde la recolección hasta 29 días después, manteniendo la fruta bajo condiciones estándar de “shelf life” (20°C, 50-60% de humedad relativa). Debido a la limitación en recursos (sobre todo humanos), las jornadas de medición no se realizaron todos los días (en los fines de semana, por ejemplo, no se realizó ninguna actividad). En cada sesión se median una vez los grupos 2,3 y 4, mientras que el grupo 1 se medía dos veces. En total, se realizaron 88 medidas con el sistema de olfato electrónico.

Al final de cada sesión se realizó una medida de calibración. En cada una de estas medidas, un microlitro de etanol se inyectaba en la cámara de concentración a través de una jeringa cromatográfica, de forma que el líquido se evaporaba casi instantáneamente en la cámara de concentración. Tras un minuto de tiempo de concentración el prototipo pasa a la fase de medida para seguir el proceso habitual de medida. Todas las medidas de calibración se realizaron siguiendo exactamente el mismo proceso y fueron almacenadas en el ordenador para poder monitorizar las derivas que sufren los sensores del prototipo a lo largo del período que duró el estudio.

### 5.3.3 Seguimiento del proceso de maduración

En primer lugar se estudió la capacidad del sistema para seguir el proceso de maduración de las manzanas a lo largo de su shelf life. Para ello se utilizaron dos métodos no supervisados como son el PCA y la red neuronal Fuzzy Art.

El análisis PCA se aplicó a las 88 medidas realizadas con nariz electrónica. Se realizaron proyecciones utilizando las diferentes familias de sensores por separado (Taguchi serie 8 y FIS series SP y SB). Se realizaron proyecciones utilizando diferentes combinaciones de parámetros y las tres primeras componentes principales en cada análisis. Para determinar las mejores agrupaciones (suponiendo que deberían agruparse por días desde la recolecta) se utilizó el criterio definido en el capítulo 4 para representaciones PCA. Puesto que la maduración es un proceso dinámico, una agrupación por días indicaría, en principio, que la nariz es capaz de seguir el proceso de maduración de las manzanas.

Tras múltiples pruebas, se comprobó que las proyecciones que presentaban agrupaciones significativas correspondían siempre a las realizadas con parámetros de los sensores FIS-SB. Desgraciadamente, el estudio realizado sobre las derivas en los sensores que se presenta en un apartado posterior atribuye estas agrupaciones a la deriva de los sensores y no al proceso de maduración. Por otro lado, ninguna combinación de parámetros utilizando los sensores Taguchi y FIS-SP generó proyecciones con

agrupaciones significativas, resultado decepcionante que, sin embargo, permite concluir que en estas dos familias de sensores no existe deriva apreciable.

Para completar el análisis no supervisado se aplicaron algoritmos Fuzzy Art a las medidas para ver como se agrupaban por semejanza . En primer lugar, se probaron múltiples combinaciones y se mantuvieron las que mejor clasificaban las medidas en función del día en que fueron realizadas. Para ello se utilizó el parámetro “separación” descrito en el capítulo 4 de esta memoria. En todas las pruebas se ajustó el parámetro vigilancia para que el algoritmo siempre clasificase las medidas de fruta en cinco clases (ya que se observaron cinco agrupaciones en el diagrama PCA).

Clase	Medidas
1	g1d01 - g1d02 - g1d02 - g2d02 - g3d02 - g4d02 - g1d03 - g1d03 - g2d03 - g3d03 - g4d03 - g1d04 - g1d04 - g2d04 - g3d04 - g4d04 - g1d07 - g1d07 - g2d07
2	g1d08 - g1d08 - g3d08 - g4d08 - g1d09 - g1d09 - g2d09 - g4d09 - g1d10 - g1d10 - g2d10 - g3d10 - g4d10 - g1d13 - g1d13 - g2d13 - g3d13 - g4d13 - g1d14 - g1d14 - g2d14 - g3d14 - g1d15 - g1d15 - g2d15 - g3d15 - g4d15 - g1d16 - g2d16 - g3d16 - g4d16
3	g1d16 - g1d17 - g1d17 - g3d17 - g4d17 - g1d19 - g1d19 - g2d19 - g3d19 - g4d19 - g1d21 - g1d21 - g2d21 - g3d21 - g4d21 - g1d23 - g1d23 - g4d23 - g1d24 - g1d24 - g2d24 - g3d24 - g4d24 - g1d27 - g4d27
4	g2d23 - g1d27 - g2d27 - g3d27 - g1d28 - g1d28 - g2d28 - g3d28 - g1d29 - g1d29 - g2d29 - g3d29
5	g4d29

Tabla 5.4: Clasificación Fuzzy Art usando sensores FIS-SB

La tabla 5.4 muestra los mejores resultados obtenidos utilizando los sensores FIS-SB. En ella, cada medida está definida por una etiqueta que especifica el grupo al que pertenece (el número después de la “g”) y el número de días entre la recolecta y la medida (el número después de la “d”). Teniendo en cuenta que los resultados con el PCA agrupaban las medidas en función del día de la medida, no es de extrañar que los resultados con el algoritmo Fuzzy Art den resultados similares (desde un punto de vista operativo, Fuzzy Art puede considerarse como una versión automática de la clasificación realizada por un PCA). Desgraciadamente, tal y como se discutirá en el apartado sobre derivas de los sensores, este resultado se debe atribuir a la deriva

temporal que sufren estos sensores a lo largo del tiempo y no al proceso de maduración de las manzanas.

La tabla 5.5 muestra los mejores resultados obtenidos para los sensores Taguchi. Como se puede observar, no hay grandes errores aunque la resolución no es muy buena, ya que la mayoría de medidas están clasificadas bajo la categoría 4. Por último, la tabla 5.6 muestra la mejor clasificación obtenida con los sensores FIS-SP, en donde se pueden detectar clasificaciones claramente erróneas, lo que nos da una idea de la eficacia de esta clase de sensores en el seguimiento de la maduración en manzanas.

Clase	Medidas
1	g1d01 - g1d02 - g1d02 - g2d02 - g3d02 - g4d02 - g1d03 - g2d03
2	g1d03 - g3d03 - g1d04 - g1d04 - g2d04 - g4d04
3	g4d03 - g3d04
4	g1d07 - g1d07 - g2d07 - g1d08 - g1d08 - g3d08 - g4d08 - g1d09 - g1d09 - g2d09 - g4d09 - g1d10 - g1d10 - g2d10 - g3d10 - g4d10 - g1d13 - g1d13 - g2d13 - g3d13 - g4d13 - g1d14 - g1d14 - g2d14 - g3d14 - g1d15 - g1d15 - g2d15 - g3d15 - g4d15 - g1d16 - g1d16 - g2d16 - g4d16 - g1d17 - g1d17 - g3d17 - g4d17 - g1d19 - g2d19 - g3d19 - g4d19 - g2d21 - g3d21 - g4d21 - g1d23 - g1d23 - g2d23 - g4d23 - g2d24 - g3d24 - g2d27 - g3d27 - g4d27
5	g3d16 - g1d19 - g1d21 - g1d21 - g1d24 - g1d24 - g4d24 - g1d27 - g1d27 - g1d28 - g1d28 - g2d28 - g3d28 - g1d29 - g1d29 - g2d29 - g3d29 - g4d29

Tabla 5.5: Clasificación Fuzzy Art utilizando sensores Taguchi

Cla se	Medidas
1	g1d01 - g1d02 - g1d02 - g2d02 - g3d02 - g4d02 - g1d03 - g1d03 - g2d03 - g4d03 - g1d04 - g1d04 - g4d04 - g1d07 - g1d07 - g2d07 - g1d08 - g3d08 - g4d08 - g1d09 - g1d09 - g2d09 - g4d09 - g1d10 - g1d10 - g2d10 - g3d10 - g4d10 - g2d13 - g4d13 - g4d16 - g3d17 - g3d19
2	g3d03 - g2d04 - g3d04 - g1d08 - g1d13 - g1d13 - g1d14 - g1d14 - g2d14 - g3d14 - g1d15 - g1d15 - g2d15 - g1d16 - g1d16 - g2d16 - g1d17 - g2d21 - g3d27 - g4d29
3	g3d13 - g3d15 - g4d15 - g3d16 - g4d17 - g4d19 - g4d21 - g4d24 - g4d27
4	g1d17 - g1d19 - g1d19 - g2d19 - g1d21 - g1d21 - g3d21 - g1d23 - g1d24 - g1d24 - g2d24 - g3d24 - g1d27 - g1d27 - g2d27 - g1d28 - g1d28 - g2d28 - g3d28 - g1d29 - g2d29 - g3d29
5	g1d23 - g2d23 - g4d23 - g1d29

Tabla 5.6: Clasificación Fuzzy Art utilizando sensores FIS-SP



Como ya se ha comentado, los resultados obtenidos para los sensores FIS-SB se deben a derivas en los sensores. En cambio, los resultados para los sensores Taguchi y FIS-SP están libres de derivas, por lo que estas dos últimas familias de sensores fueron las únicas que se utilizaron para correlar las señales medidas con el sistema de olfato electrónico frente a los parámetros obtenidos aplicando técnicas destructivas a las muestras seleccionadas en cada jornada.

#### **5.3.4 Correlación entre parámetros destructivos y señales de los sensores del prototipo**

Como se ha comentado en la sección 5.3.2, un total de nueve piezas de los grupos medidos en cada jornada fueron destruidas para obtener parámetros de calidad. Para comparar objetivamente la eficacia de la nariz electrónica frente a técnicas clásicas, los valores obtenidos con las técnicas destructivas se emparejaron con las obtenidas con la nariz electrónica en la misma jornada. De esta manera se formaron 88 parejas de valores.

Aunque inicialmente se consideró la utilización de redes neuronales tipo “feed-forward” con entrenamiento “backpropagation”, finalmente se optó por no utilizarlas debido a su carga computacional durante la fase de aprendizaje y por no disponer de un número suficientemente elevado de medidas para poder entrenar y validar la red correctamente. El algoritmo PLS (Partial Least Squares) fue escogido debido a las limitaciones de la aplicación. Durante una fase de entrenamiento, el algoritmo PLS construye un modelo que describe la relación entre las señales de los sensores y los parámetros de la fruta que deben ser predichos. En la fase de evaluación, dicho modelo predice el parámetro de calidad de una nueva medida no utilizada durante el entrenamiento a partir de las señales de los sensores obtenidas con la nariz electrónica.

Para evaluar la capacidad de la nariz electrónica en la predicción de parámetros de calidad se aplicó una validación cruzada de orden 1 (un “leave one out”). Bajo esta metodología, se utilizan 87 medidas para crear el modelo PLS y la restante sirve para testear dicho modelo. La utilización de este proceso, que se repite 88 veces (tantas como

medidas) permite explotar al máximo la información que se puede obtener de un conjunto de medidas reducido. Hay que recalcar que para cada modelo PLS creado los datos del conjunto de entrenamiento son autoescalados, mientras que la medida restante es centrada y escalada con el valor medio y la varianza del conjunto de entrenamiento. Junto a los parámetros típicos que se pueden extraer de los sensores, se suministro al modelo información de humedad relativa en el interior de la cámara así como el peso y superficie medias de las piezas utilizadas en cada medida.

Indicador de calidad	Ssq	Coef. Corr	m	b	Lv
Firmeza	0.1262	0.93	0.91	0	18
Índice de almidón	0.6	0.68	0.63	0.02	27
PH	0.29	0.84	0.78	0	12

Tabla 5.7: Resultados de predicción en indicadores de calidad

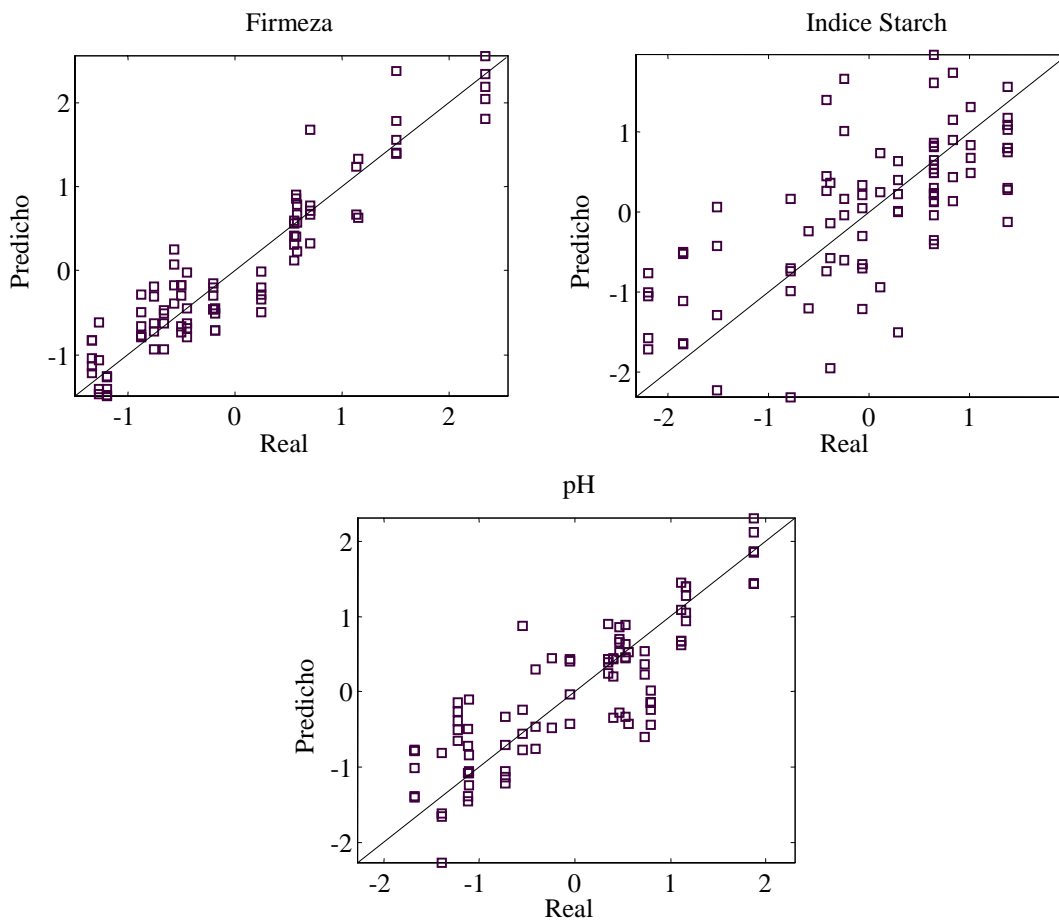


Figura 5.5: Gráficas de predicciones para los parámetros destructivos

La tabla 5.7 muestra el error cuadrático medio ( $S_{sq}$ ), el coeficiente de correlación, el número óptimo de variables latentes ( $lv$ ), la pendiente ( $m$ ) y la constante de corte ( $b$ ) para cada uno de los tres parámetros destructivos predichos por el sistema. Se puede observar como la firmeza es el parámetro destructivo mejor predicho. La figura 5.5 muestra las predicciones realizadas por la nariz comparando el valor real de cada medida con el predicho por el modelo. Cabe recordar que una predicción ideal dejaría todos los puntos sobre la diagonal, donde el valor real y el predicho son exactamente iguales. Es importante aclarar que tanto los valores predichos como los reales han sido autoescalados previamente, por lo que no debe extrañar encontrar, por ejemplo, valores negativos para la firmeza.

Como la mayoría de los indicadores de calidad presentan una evolución monótona (creciente o decreciente) a lo largo del tiempo, es importante comprobar si la deriva de algún sensor es utilizada por el modelo PLS para realizar predicciones ajustadas de alguno de los parámetros. Estas comprobaciones (tal y como se detallan en el siguiente subapartado) confirmaron que la deriva de los sensores no alteró el proceso de correlación a lo largo de la duración de todo el estudio.

### 5.3.5 Estudio de las derivas de los sensores

Tal y como se ha comentado previamente, las derivas en los sensores pueden ser un factor decisivo que debe ser monitorizado cuidadosamente, ya que el proceso de maduración está íntimamente ligado al paso del tiempo. En la rutina de medida de las manzanas se tomó la precaución de realizar medidas de calibración de forma sistemática para determinar qué sensores presentan derivas en el intervalo de tiempo que abarca el estudio. Solo de esta forma se puede estar seguro de si los resultados obtenidos son fruto de la detección del proceso de maduración de la fruta o son provocados por una deriva intrínseca en la señal de los sensores.

Al final de cada jornada, durante todo el tiempo que duró el estudio, se inyectó un microlitro de etanol en la cámara de concentración (la misma cámara en la que se depositaba la fruta) a través de un septum habilitado para este fin. Como la inyección se realizaba con una jeringa cromatográfica, el etanol líquido se volatilizaba prácticamente

al instante al ser inyectado. A partir de ese momento se activaba el prototipo para realizar una medida estándar en la que únicamente cambiaba el tiempo de concentración, que quedaba reducido a un minuto, ya que no era necesario esperar a que la fruta concentrara suficientes volátiles. En definitiva, desde el día de la recolecta al final del estudio se realizaron medidas de calibración siguiendo siempre un procedimiento idéntico. Después, junto con las medidas de fruta, se aplicaron diversos algoritmos de reconocimiento de patrones para evaluar las derivas de los sensores y decidir si influían o no en los resultados obtenidos.

Si recordamos el análisis PCA realizado a las medidas de fruta, sólo las proyecciones realizadas con parámetros de los sensores FIS-SB presentaban agrupaciones de las medidas acorde con el día de la medición. Para comprobar si las derivas habían influenciado en la proyección, las medidas de calibración se incluyeron en el análisis PCA de dos formas diferentes. Las figuras 5.6 y 5.7 muestran las proyecciones cuando se fusionaron todas las medidas siguiendo dos métodos diferentes. En estas figuras, cada medida está representada por una leyenda que distingue entre medidas de fruta y de calibración (cadena alfanumérica que empieza por una “d” o “cal” respectivamente) y que especifica el número de días transcurridos desde la cosecha. Con algunas excepciones (debidas a contratiempos en alguna medida) , la mayoría de jornadas incluyen 5 medidas de fruta (2 para el grupo 1, una para los grupos 2, 3 y 4) y una adicional de calibración.

La figura 5.6 muestra la proyección resultante en la que las medidas de calibración y de fruta se utilizan conjuntamente desde el principio para calcular las componentes principales del análisis. Como se puede observar, las medidas de fruta y calibración están claramente separadas, pero una inspección más detallada revela que la distribución de clusters dentro de el área en la que están situadas las medidas de calibración es muy parecida a la distribución por días de las medidas de fruta, tal y como se indica en la misma figura. En definitiva, este resultado no aclara si las derivas son o no el motivo de las agrupaciones observadas entre las medidas de fruta. Por ese motivo se decidió aplicar el algoritmo PCA de forma supervisada.

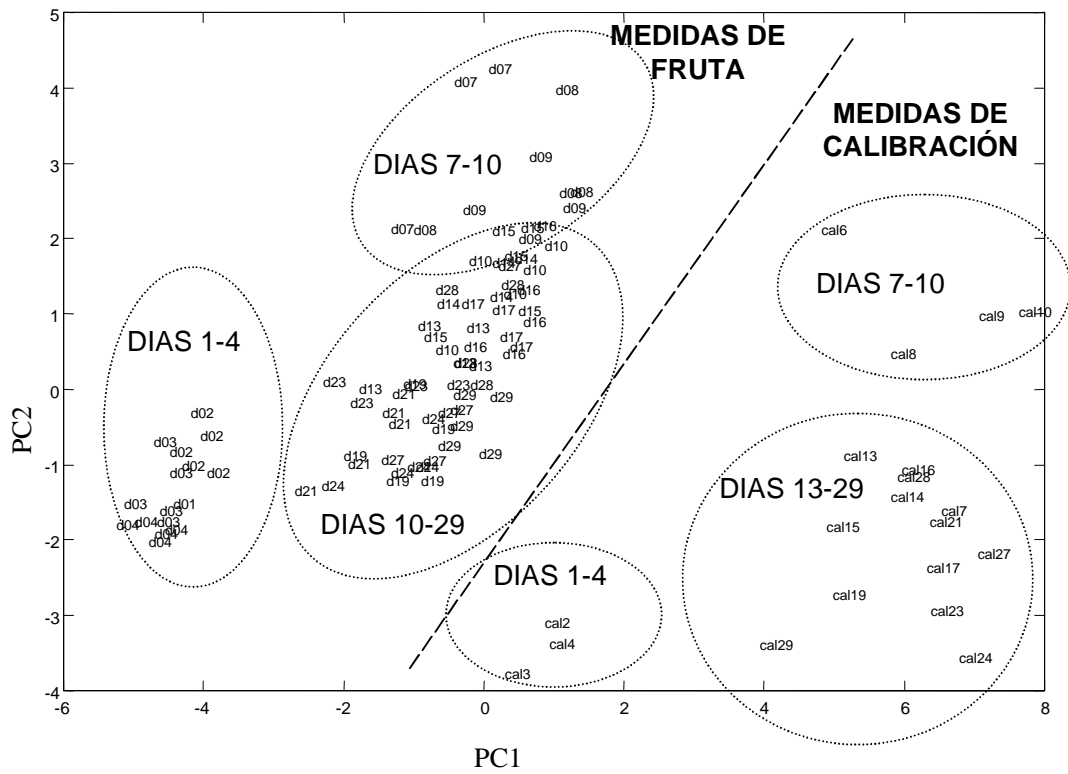


Figura 5.6: PCA con las medidas de fruta y calibración en modo no supervisado

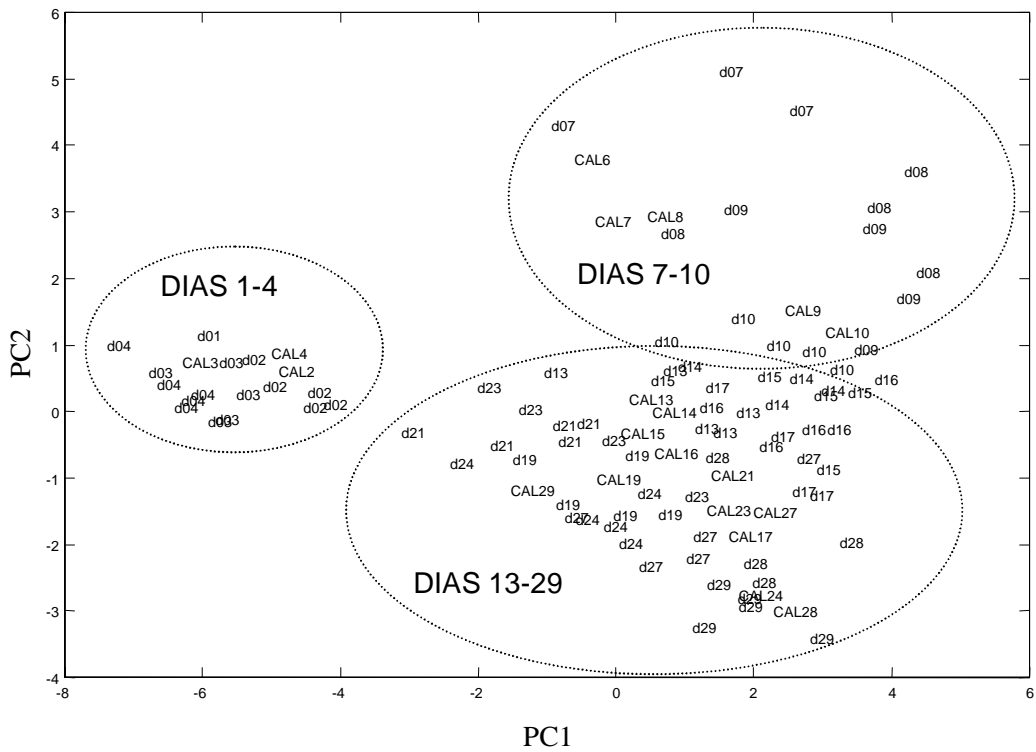


Figura 5.7: PCA de las medidas de fruta y calibración en modo supervisado

La figura 5.7 muestra las proyecciones resultantes de aplicar el PCA según la segunda opción. Este método se basa en determinar las componentes principales utilizando única y exclusivamente las medidas de fruta. Una vez determinadas las direcciones de máxima varianza, se proyectan tanto las medidas con fruta como las de calibración bajo las dos primeras componentes principales. Como se puede observar, las medidas de calibración realizadas el mismo día que las de fruta comparten una misma agrupación.

Este resultado es una clara indicación de que las derivas de los sensores son las responsables de que aparezcan agrupaciones de medidas según los días transcurridos desde la cosecha. Por lo tanto, se puede concluir que los sensores FIS-SB experimentan derivas que falsean los resultados obtenidos con el algoritmo PCA.

Clase	Medidas
1	g1d01 - g1d02 - g1d02 - g2d02 - g3d02 - g4d02 - g1d03 - g1d03 - g2d03 - g3d03 - g4d03 - g1d04 - g1d04 - g2d04 - g3d04 - g4d04 - g1d07 - g1d07 - g2d07 - g1d08 - g1d13
2	CAL2- - CAL3- - CAL4- - - CAL6- - - CAL7
3	g1d08 - g3d08 - g4d08 - g1d09 - g1d09 - g2d09 - g4d09 - g1d10 - g1d10 - g2d10 - g3d10 - g4d10 - g1d13 - g2d13 - g3d13 - g4d13 - g1d14 - g1d14 - g2d14 - g3d14 - g1d15 - g1d15 - g2d15 - g3d15 - g4d15 - g1d16 - g1d16 - g2d16 - g3d16 - g4d16 - g1d17 - g1d17 - g4d17 - g1d19 - g1d19 - g3d19 - g4d19 - g2d21 - g1d23
4	CAL8- - CAL9- - CAL10 - CAL13 - CAL14 - CAL15 - CAL16
5	g3d17 - g2d19 - g1d21 - g1d21 - g3d21 - g4d21 - g1d23 - g2d23 - g4d23 - g1d24 - g1d24 - g2d24 - g3d24 - g4d24 - g1d27 - g1d27 - g2d27 - g3d27 - g4d27 - g1d28 - g1d28 - g2d28 - g3d28 - g1d29 - g2d29
6	CAL17 - CAL19 - CAL21 - CAL23 - CAL24 - CAL27 - CAL28 - CAL29
7	g1d29 - g3d29 - g4d29

Tabla 5.8: Clasificación Fuzzy Art utilizando sensores FIS-SB incluyendo medidas de calibración

Para comprobar si los resultados obtenidos con Fuzzy Art también estaban influenciados por las derivas, el algoritmo de clasificación neuronal se utilizó con las medidas de fruta y calibración de forma conjunta. Las tablas 5.8, 5.9 y 5.10 muestran los resultados obtenidos para los sensores FIS-SB, Taguchi y FIS-SP respectivamente. Una vez más, las medidas de calibración están identificadas por una etiqueta que comienza con las siglas CAL y cuyo número identifica el día de la experiencia. La

identificación de las medidas de fruta sigue el mismo criterio ya presentado en la tabla 5.4.

Clase	Medidas
1	g1d01 - g1d02 - g1d02 - g2d02 - g3d02 - g4d02 - g1d03 - g1d03 - g2d03 - g1d04 - g1d04 - g2d07 - g4d09 - g1d10 - g2d10 - g4d10 - g1d13 - g2d13 - g4d13 - g4d15 - g1d16 - g1d19 - g2d19 - g3d19
2	CAL2- - CAL3- - CAL4- - CAL6- - CAL9- - CAL21 - CAL23
3	g3d03 - g4d03 - g2d04 - g3d04 - g4d04 - g1d27 - g1d29 - g1d29
4	g1d07 - g1d07 - g1d08 - g1d08 - g3d08 - g4d08 - g1d09 - g1d09 - g2d09 - g1d10 - g3d10 - g1d13 - g3d13 - g1d14 - g1d14 - g2d14 - g3d14 - g1d15 - g1d15 - g2d15 - g3d15 - g1d16 - g2d16 - g3d16 - g4d16 - g1d17 - g1d17 - g3d17 - g4d17 - g1d19 - g4d19 - g1d21 - g1d21 - g2d21 - g3d21 - g4d21 - g1d23 - g1d23 - g2d23 - g4d23 - g1d24 - g1d24 - g2d24 - g3d24 - g4d24 - g1d27 - g2d27 - g3d27 - g4d27 - g1d28 - g1d28 - g2d28 - g3d28 - g3d29
5	CAL7- - CAL8- - CAL10 - CAL13 - CAL14 - CAL15 - CAL16 - CAL17 - CAL19 - CAL27 - CAL28
6	CAL24
7	g2d29 - g4d29
8	CAL29

Tabla 5.9: Clasificación Fuzzy Art utilizando sensores Taguchi incluyendo medidas de calibración

Clase	Medidas
1	G1d01 - g1d02 - g1d02 - g2d02 - g3d02 - g4d02 - g1d03 - g1d03 - g2d03 - g3d03 - g4d03 - g1d04 - g1d04 - g4d04 - g1d07 - g1d07 - g2d07 - g1d08 - g1d08 - g3d08 - g4d08 - g2d09 - g1d13 - g1d13 - g4d13 - g1d14 - g3d14 - g1d19 - g1d24 - g1d28
2	CAL2- - CAL3- - CAL4- - CAL6- - CAL7- - CAL8- - CAL9- - CAL10 - CAL13 - CAL14 - CAL15 - CAL16 - CAL17 - CAL21 - CAL23 - CAL24 - CAL27 - CAL29
3	G2d04 - g3d04 - g1d09 - g1d09 - g4d09 - g1d10 - g1d10 - g2d10 - g3d10 - g4d10 - g2d13 - g1d14 - g2d14 - g1d15 - g1d15 - g2d15 - g1d16 - g1d16 - g2d16 - g4d16 - g1d17 - g1d17 - g3d17 - g1d19 - g1d21 - g2d21 - g3d21 - g1d23 - g4d23 - g1d24 - g2d24 - g3d24 - g4d24 - g1d27 - g2d27 - g3d27 - g1d28 - g1d29 - g1d29 - g4d29
4	G3d13 - g3d15 - g4d15 - g4d17 - g2d19 - g3d19 - g4d19 - g4d21 - g1d23 - g2d23 - g1d27 - g4d27 - g3d28
5	G3d16 - g1d21 - g2d28 - g2d29 - g3d29
6	CAL19 - CAL28

Tabla 5.10: Clasificación Fuzzy Art utilizando sensores FIS-SP incluyendo medidas de calibración

De las tablas se puede concluir que el algoritmo Fuzzy Art separa perfectamente las medidas de calibración de las de fruta para las tres familias de sensores. Por otro lado, fijándonos en la clasificación de las medidas de calibración, se puede ver claramente que los sensores FIS-SB las distribuyen en tres categorías según el día en que se realizaron. Por el contrario, tanto en el caso de los sensores Taguchi como de los FIS-SP se puede comprobar que no se agrupan siguiendo el orden de medida, una clara indicación de que no existe una deriva temporal en estas dos familias de sensores. Por ese motivo sólo se utilizaron estos sensores en el proceso de correlación.

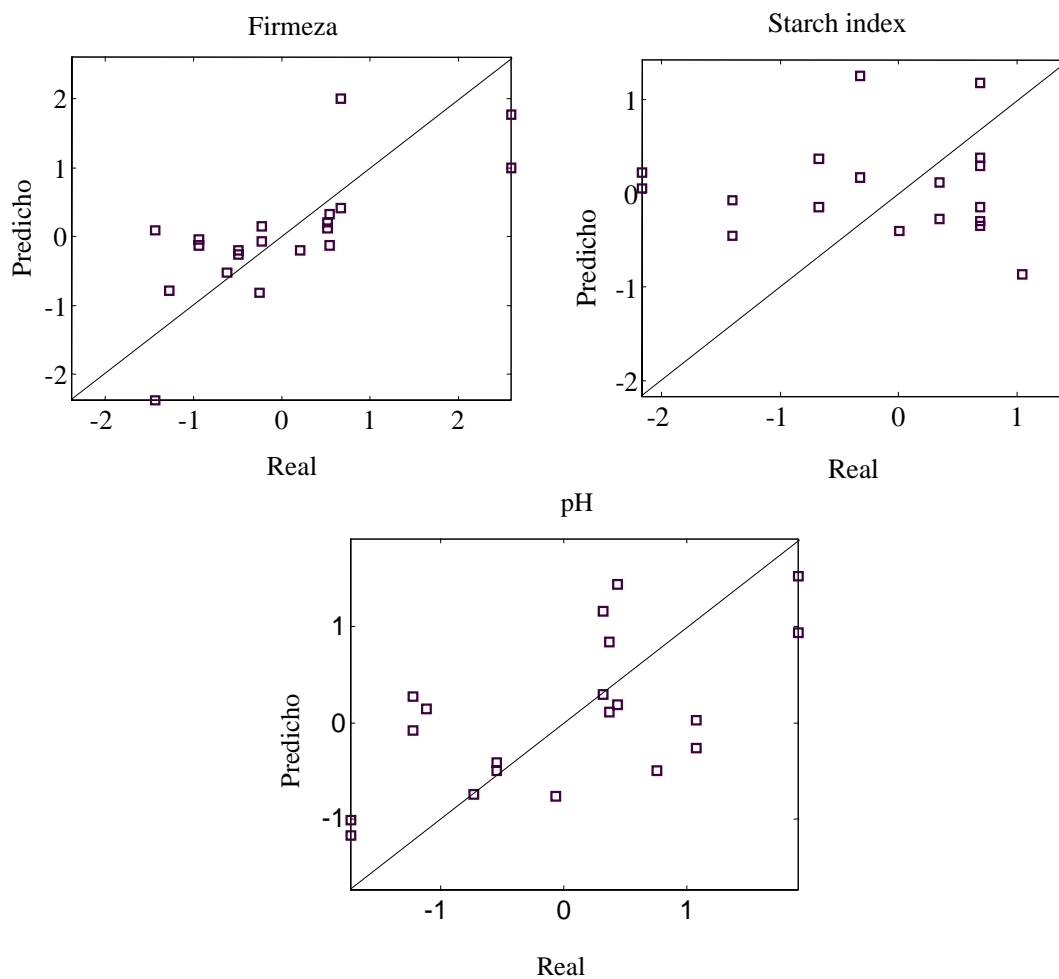


Figura 5.8: Predicciones utilizando las medidas de calibración

Finalmente, para comprobar si las predicciones realizadas con estas dos familias de sensores podían estar influenciadas por derivas, se realizaron predicciones con modelos PLS utilizando únicamente las medidas de calibración. Si las predicciones hubiesen



resultado acertadas, eso sería una clara indicación de que las predicciones que realiza el sistema de olfato electrónico son debidas a las derivas de los sensores y no a la interacción de éstos con la sucesiva evolución de los vapores emitidos por la fruta a lo largo de su proceso de maduración. Si las predicciones son hechas de forma aleatoria significaría que el éxito obtenido previamente en las predicciones de los parámetros destructivos son debidas exclusivamente a la información captada por los sensores en las sucesivas medidas realizadas con la fruta.

La figura 5.8 muestra los resultados de predicción obtenidos utilizando las medidas de calibración como la información de entrada para el algoritmo PLS. Como se puede observar, el modelo PLS realiza predicciones de forma totalmente aleatoria y por lo tanto inexacta, prueba de que la exactitud en las predicciones realizadas con las medidas de fruta son debidas a la evolución de la producción aromática a lo largo del proceso de maduración y no a la deriva de los sensores.

### 5.3.6 Conclusiones

Una vez más, las señales obtenidas con el segundo prototipo son suficientemente claras para que el sistema detecte la presencia de manzanas en su cámara de concentración. Sin embargo, la evolución de la señal a lo largo de dicho proceso sigue siendo débil y no es aprovechada por los algoritmos no supervisados como el PCA o Fuzzy Art para monitorizar el proceso de maduración de forma clara. Se tiene que recurrir de nuevo a un método supervisado (en este caso un algoritmo PLS) para poder obtener pruebas de que de una nariz electrónica puede monitorizar el proceso de maduración de las manzanas. La buena predicción de parámetros destructivos con las señales recogidas con la nariz electrónica (a través de medidas no destructivas) confirma la viabilidad de utilizar la nariz electrónica como instrumento de monitorización del proceso de maduración en manzanas.

Sin embargo, las interferencias como las derivas en los sensores y la variabilidad intrínseca a la fruta hace necesario un perfeccionamiento tanto de la metodología

experimental como de la tecnología en los sensores para que el sistema sea plenamente comercial.

Por otro lado , la detección de derivas importantes en los sensores FIS-SB ha permitido tomar la decisión de eliminarlos de los estudios con las variedades de pera y melocotón. Por contra, los sensores Taguchi y FIS-SP se seguirán utilizando tras confirmar que no presentan derivas apreciables que puedan falsear los resultados.

## **REFERENCIAS**

[5.1] Brezmes J.; Llobet E.; Vilanova X.; Saiz G.; Correig X., *Fruit ripeness monitoring using an electronic nose, Sensors and Actuators B-Chemical*, (2000), vol 69, num 3, 223-229

[5.2] Brezmes J. ; Llobet E.; Vilanova X.;Saiz G.; Correig X.; *Correlation between electronic nose signals and fruit quality indicators on shelf-life measurements with pinklady apples*, Sensors and Actuators B-Chemical (2001) vol 80, 41-50

[5.3] Brezmes J; Llobet E; Vilanova X ; Saiz G; Correig X., *Evaluation of the electronic nose as a novel instrument to assess fruit ripeness*, Eurodeur-airodeur, Paris, Junio 2001

[5.4] Brezmes J; Llobet E; Vilanova; López M.L.; Recasens I., X ; Saiz G; Correig X., *Design and evaluation of an electronic nose to assess fruit ripeness*, IEEE Sensors (enviado)