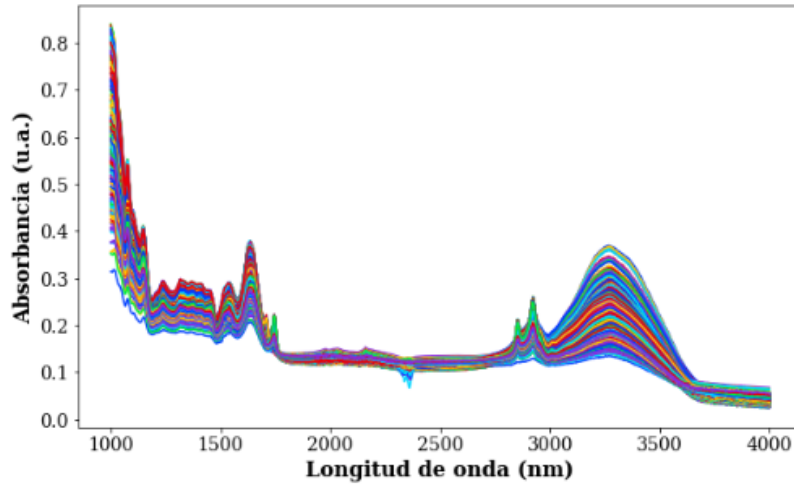
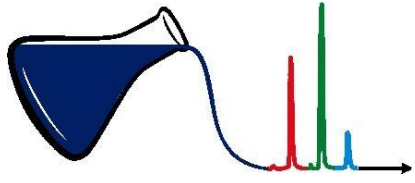
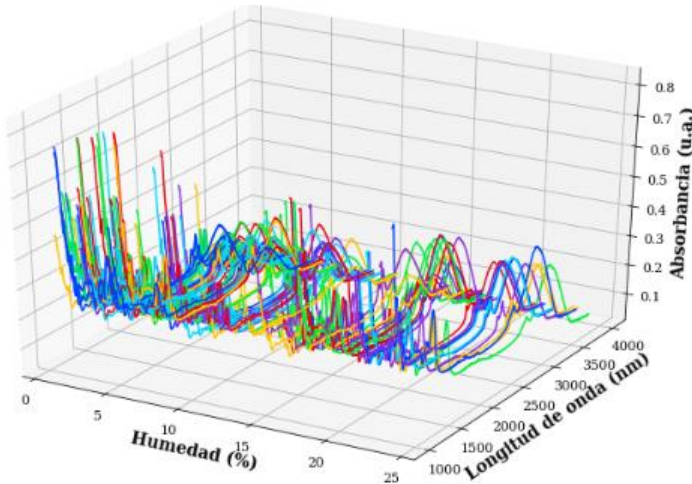




TEMA



Machine Learning en quimiometría aplicada a datos NIRS (Near Infrared Spectroscopy)





Jesús Alfredo Obregón Domínguez

Ingeniero y Maestro en Ciencias con mención en Estadística Aplicada, especialista en procesamiento de datos, diseño de experimentos, inteligencia artificial, machine learning, deep learning y análisis sensorial de alimentos; experiencia en sistemas de gestión de la calidad, mejora continua, logística, producción, control de calidad, Six Sigma, laboratorios de análisis de investigación y desarrollo.



CITE agroindustrial
Chavimochic



Innóvate Perú



CITEagroindustrial
Chavimochic



Universidad Nacional
Federico Villarreal

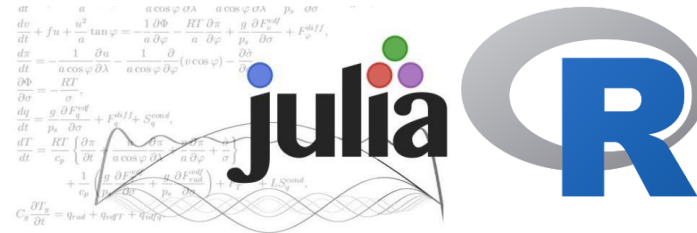


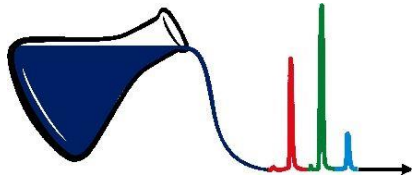
PONTIFICIA
UNIVERSIDAD
CATÓLICA
DEL PERÚ



Áreas de interés

- Analítica de datos
- Inteligencia artificial
- Machine learning
- Deep learning
- Estadística deportiva
- Banca y microfinanzas
- Telecomunicaciones
- Empresas aseguradoras
- Retail
- Diseño de experimentos
- Bioestadística
- Mercadotecnia
- Mejora continua
- Pruebas sensoriales de alimentos
- Determinación de vida útil
- Enfoque Bayesiano
- Six sigma





TEMA

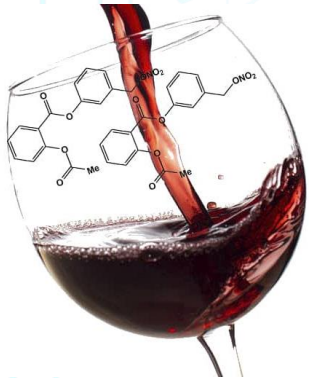


Machine Learning en quimiometría aplicada a datos NIRS (Near Infrared Spectroscopy)





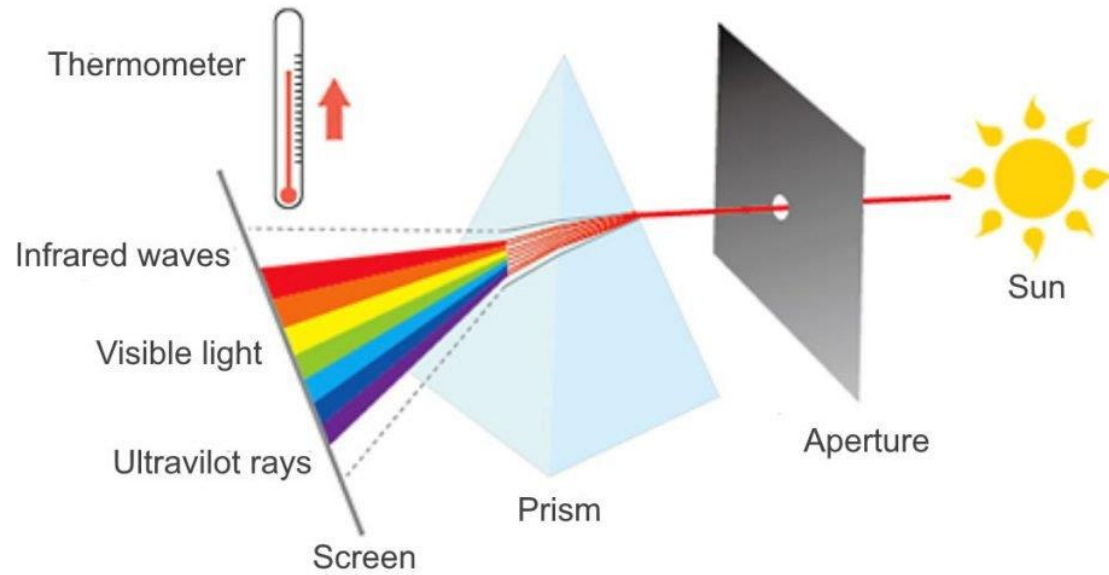
Retos de la industria moderna



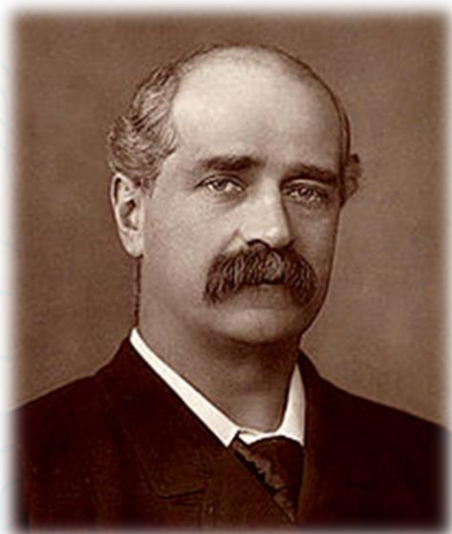
¿Qué es NIRS?



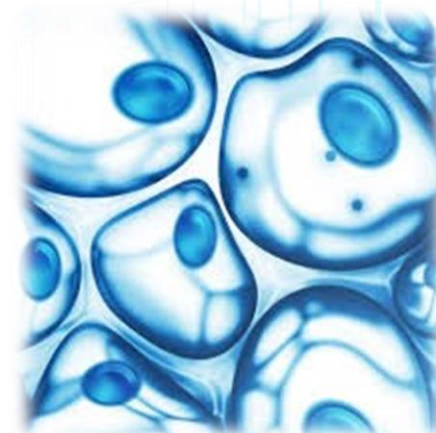
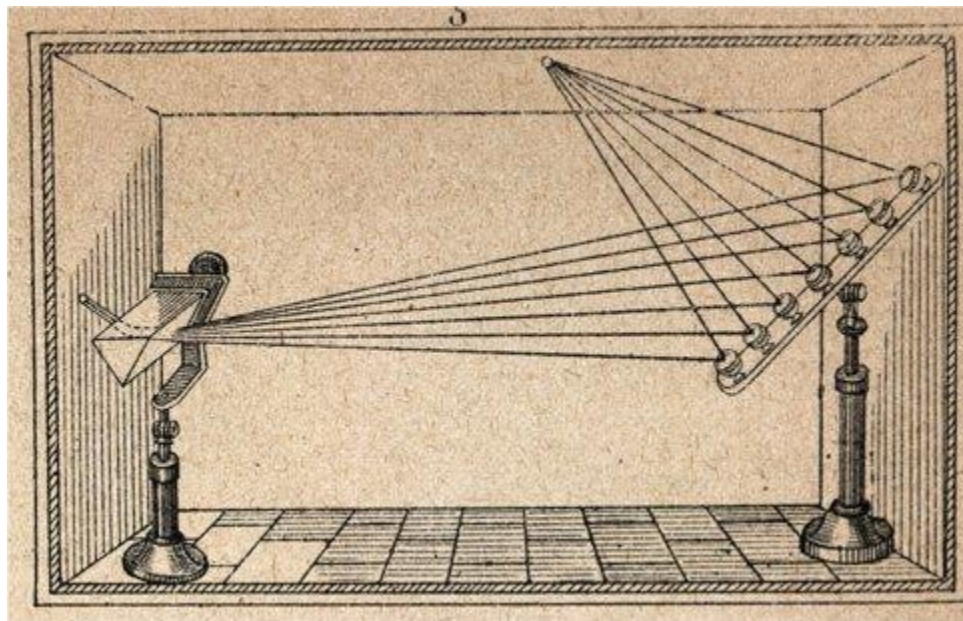
Sir William Herschel
(1800)



¿Qué es NIRS?



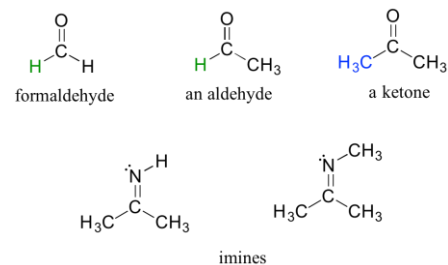
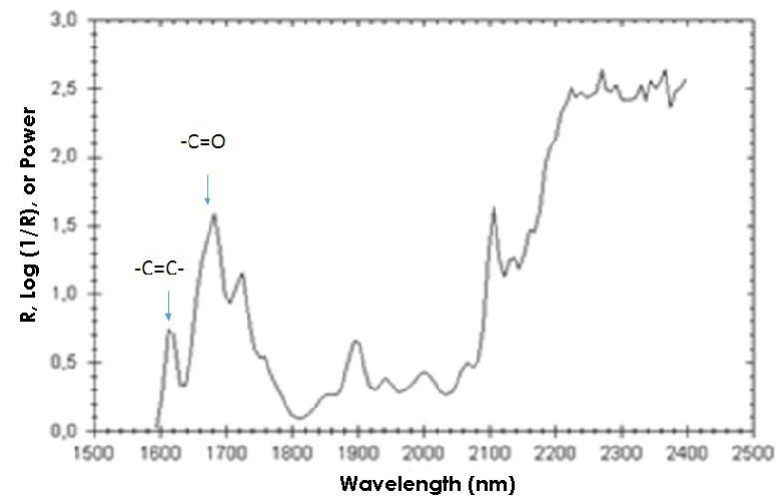
**Abney y Festing
(1881)**



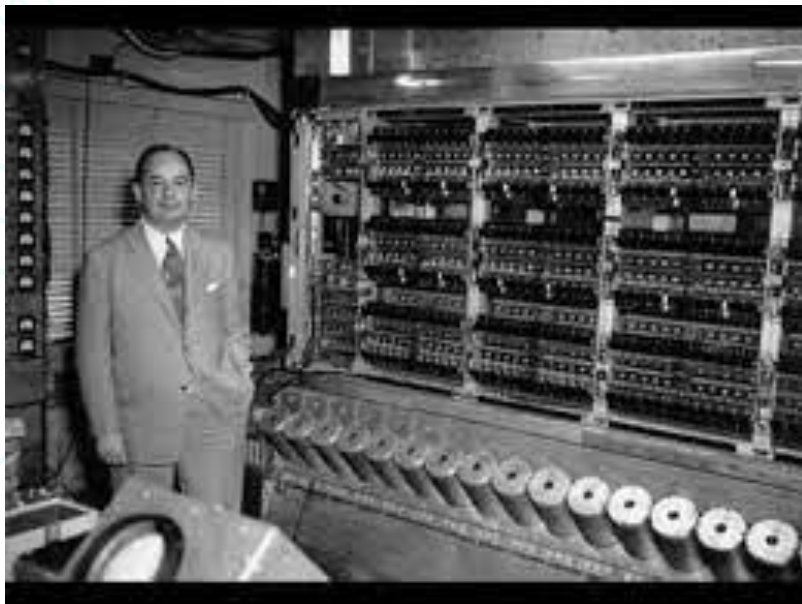
¿Qué es NIRS?



**Wilbur Kaye
(1950)**



¿Qué es NIRS?



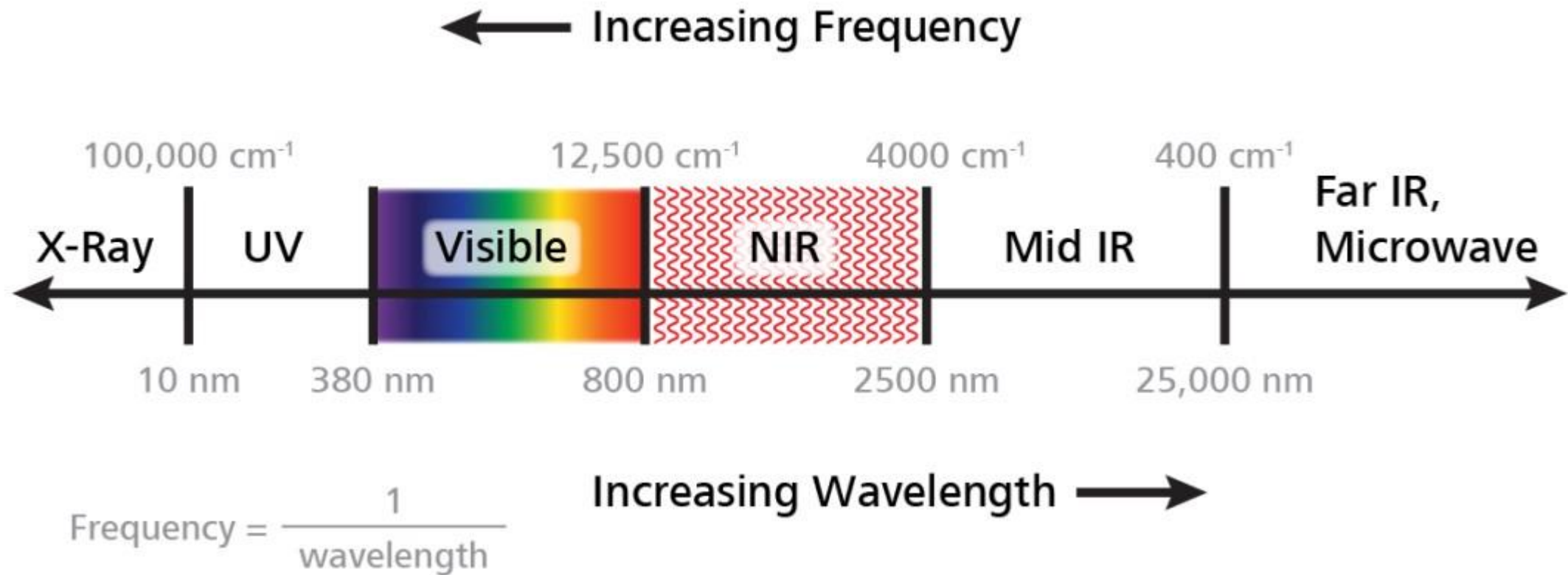
1970



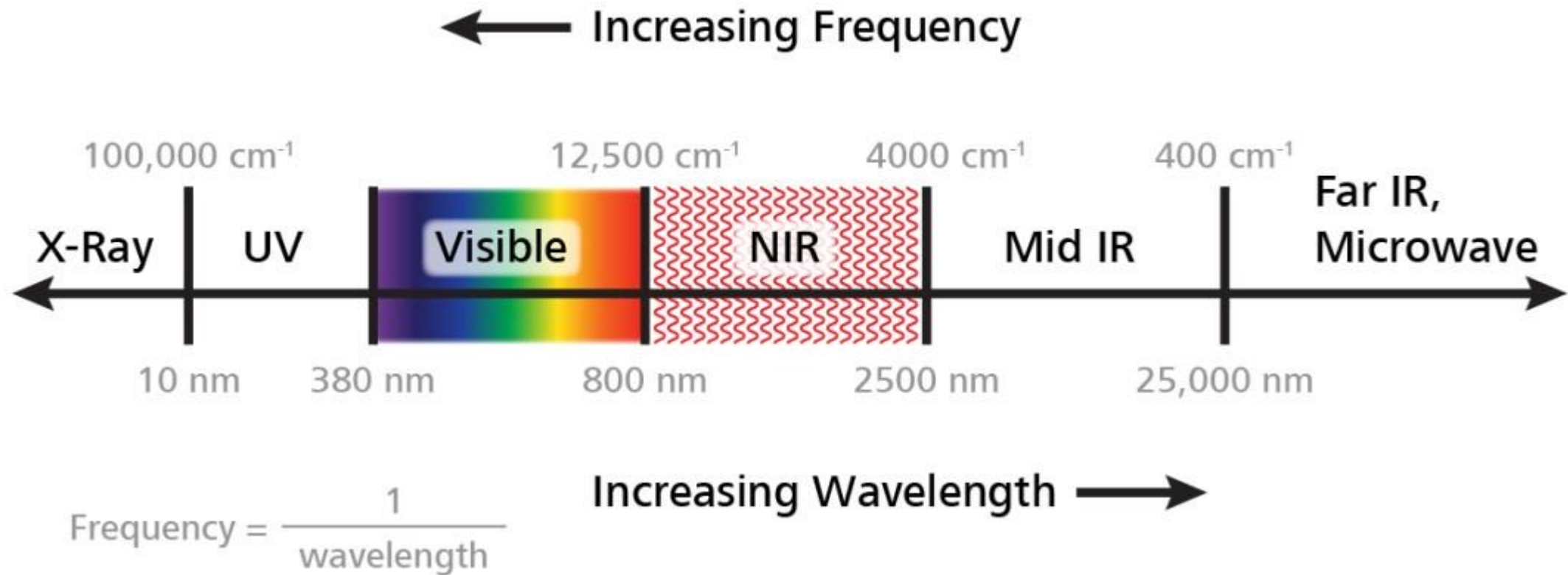
¿Qué es NIRS?



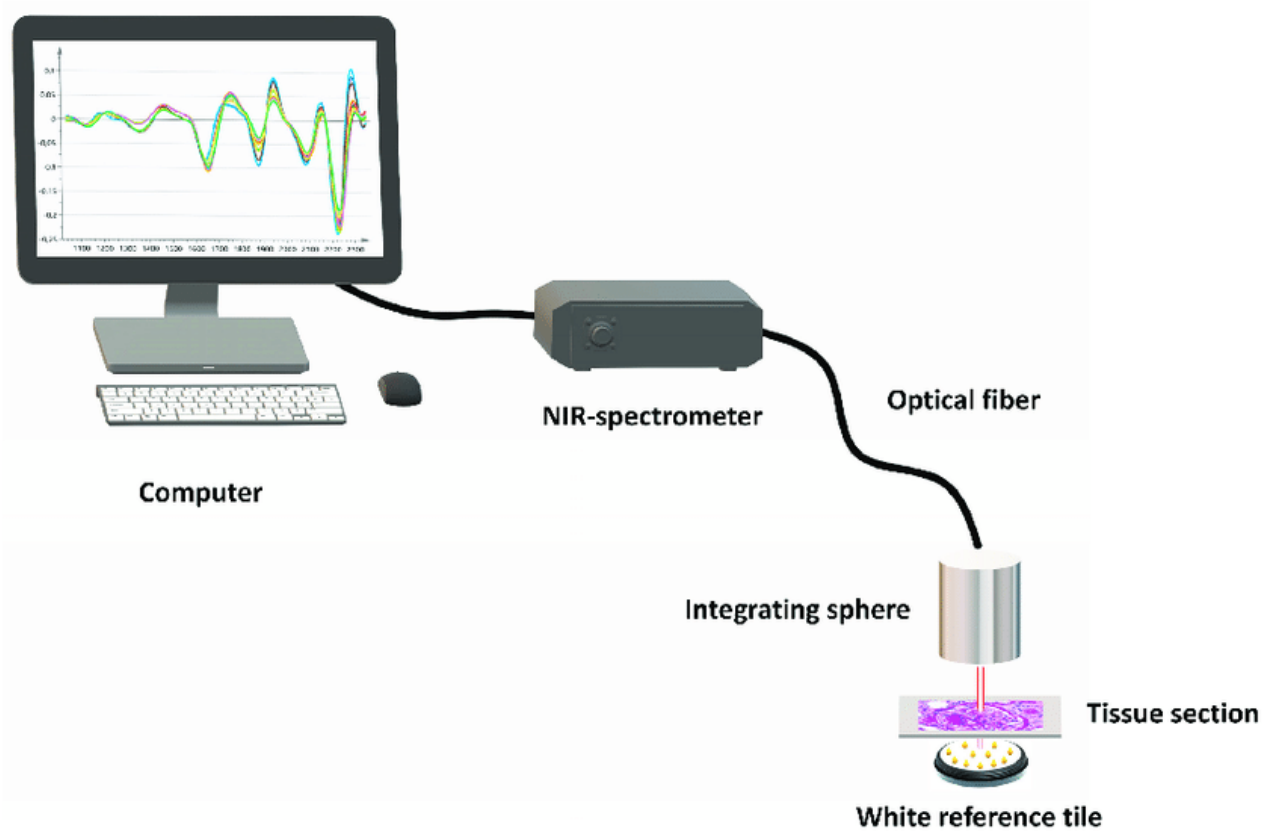
¿Qué es NIRS?



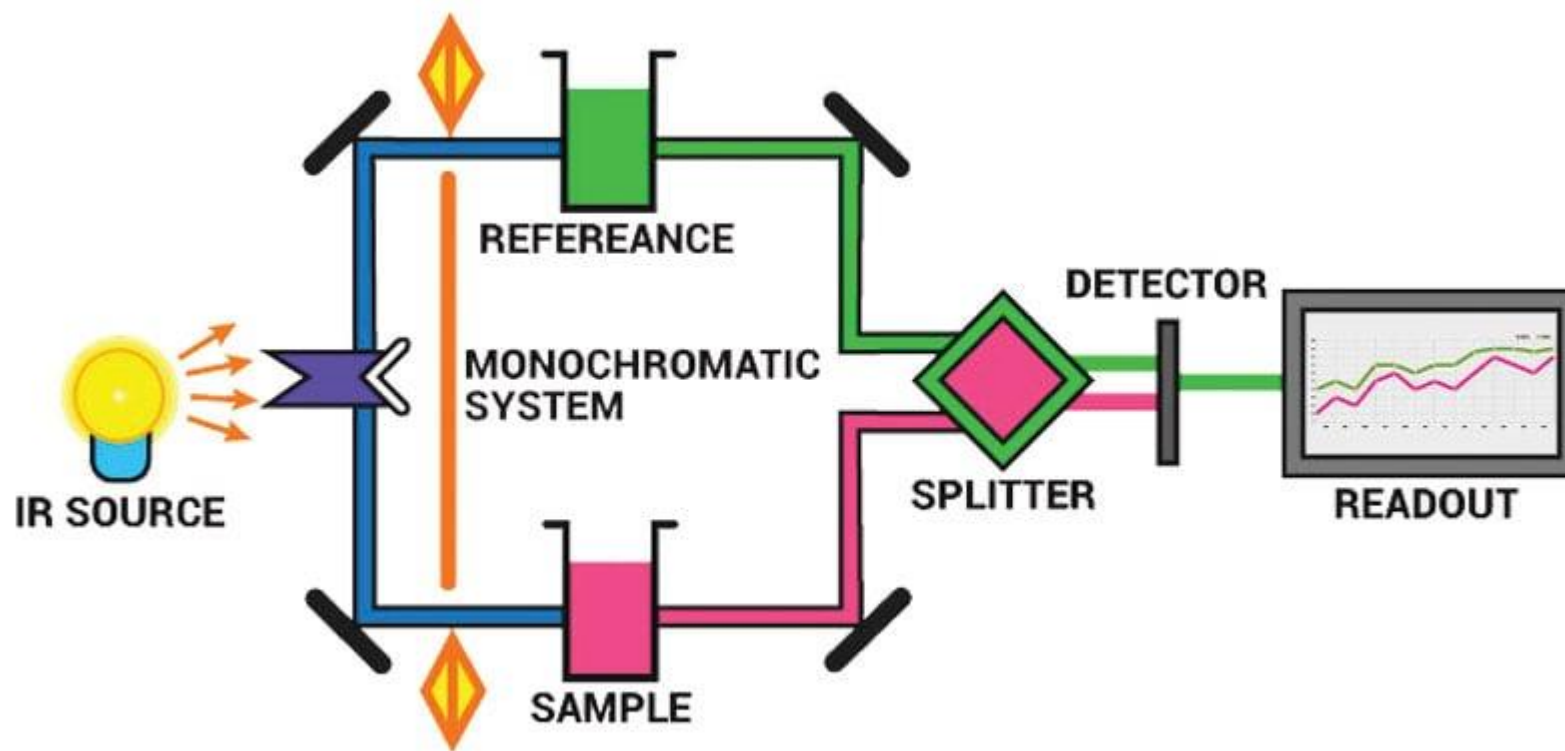
Near Infrared Spectroscopy



Quimiometría aplicada a datos NIRS



Quimiometría aplicada a datos NIRS



Quimiometría aplicada a datos NIRS

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J					
1	M1R1	13.99	M1R2	13.64	M1R3	13.86	M1R4	13.70	M1R5	14.40					
2	Long Ond.▼	Absorban▼	Long Ond.▼	Absorban▼	Long Ond.▼	Absorban▼	Long Ond.▼	Absorban▼	Long Ond.▼	Absorban▼					
3	400.1635	-0.16401	400.1635	-0.10608	400.1635	-0.18206	400.1635	6.00000	400.1635	0.23302					
4	400.6456	-0.06066	400.6456	-0.00797	400.6456	-0.23379	400.6456	6.00000	400.6456	0.09878					
5	401.1277	0.07407	401.1277	0.15982	401.1277	-0.27336	401.1277	6.00000	401.1277	-0.05463					
6	401.6098	0.22970	401.6098	0.39351	401.6098	-0.28955	401.6098	6.00000	401.6098	-0.20022					
7	402.0919	0.34125	402.0919	0.62905	402.0919	-0.28892	402.0919	6.00000	402.0919	-0.34933					
8	402.5741	0.32188	402.5741	0.70493	402.5741	-0.28631	402.5741	-3.91005	402.5741	-0.56745					
9	403.0562	0.21294	403.0562	0.64652	403.0562	-0.30578	403.0562	6.00000	403.0562	-1.36413					
10	403.5383	0.10225	403.5383	0.61060	403.5383	-0.43646	403.5383	6.00000	403.5383	6.00000					
11	404.0204	0.01791	404.0204	0.67126	404.0204	6.00000	404.0204	-1.90861	404.0204	6.00000					
12	404.5026	-0.04387	404.5026	0.95208	404.5026	6.00000	404.5026	-0.24029	404.5026	6.00000					
13	404.9847	-0.09313	404.9847	6.00000	404.9847	6.00000	404.9847	0.21071	404.9847	6.00000					
14	405.4668	-0.13761	405.4668	6.00000	405.4668	6.00000	405.4668	0.31592	405.4668	-0.99148					
15	405.9489	-0.17378	405.9489	6.00000	405.9489	-0.59272	405.9489	0.34098	405.9489	-0.55682					
16	406.4311	-0.18127	406.4311	6.00000	406.4311	-0.25882	406.4311	0.37075	406.4311	-0.45361					
17	406.9132	-0.14426	406.9132	6.00000	406.9132	0.00917	406.9132	0.39969	406.9132	-0.46405					
18	407.3953	-0.06569	407.3953	6.00000	407.3953	0.39097	407.3953	0.36544	407.3953	-0.59298					
19	407.8774	0.06443	407.8774	-1.28569	407.8774	0.96408	407.8774	0.20552	407.8774	-0.97444					
20	408.3596	0.33117	408.3596	-0.73124	408.3596	0.71994	408.3596	-0.01417	408.3596	6.00000					
21	408.8417	6.00000	408.8417	-0.56233	408.8417	0.28758	408.8417	-0.18469	408.8417	6.00000					
	< >	CORRIDA 7		CORRIDA 8		CORRIDA 9		CORRIDA 10		CORRIDA 11		CORRIDA 12		+	:

Quimiometría aplicada a datos NIRS

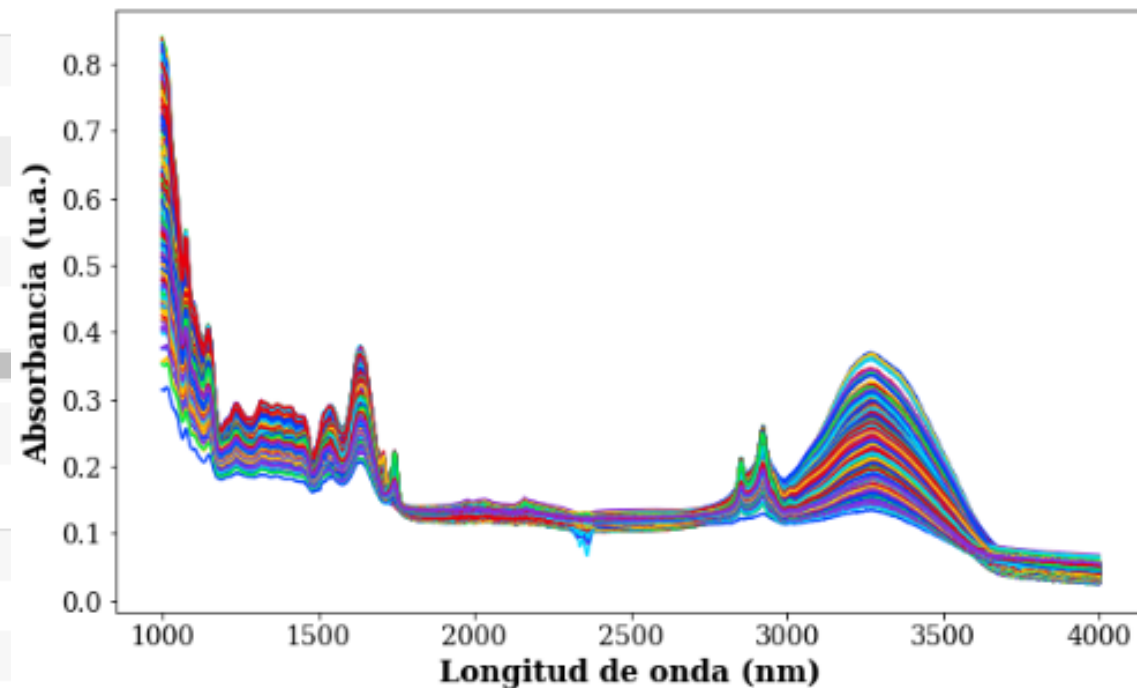
data_espectro .head()

M1R1	1000.409	1000.891	1001.373	1001.855	1002.337	1002.819	1003.301	1003.783	1004.266	1004.748
0	0.717984	0.717921	0.717439	0.716728	0.716004	0.715422	0.715034	0.714801	0.714651	0.714538
1	0.734994	0.734869	0.734533	0.734184	0.733971	0.733934	0.733988	0.733987	0.7338	0.733391
2	0.675829	0.675947	0.6759	0.675826	0.675828	0.67593	0.676076	0.676168	0.676131	0.675966
3	0.711542	0.711149	0.710646	0.710275	0.710197	0.710438	0.71089	0.711383	0.711773	0.712007
4	0.664752	0.664558	0.664053	0.663419	0.662823	0.662354	0.662003	0.661695	0.661358	0.660969

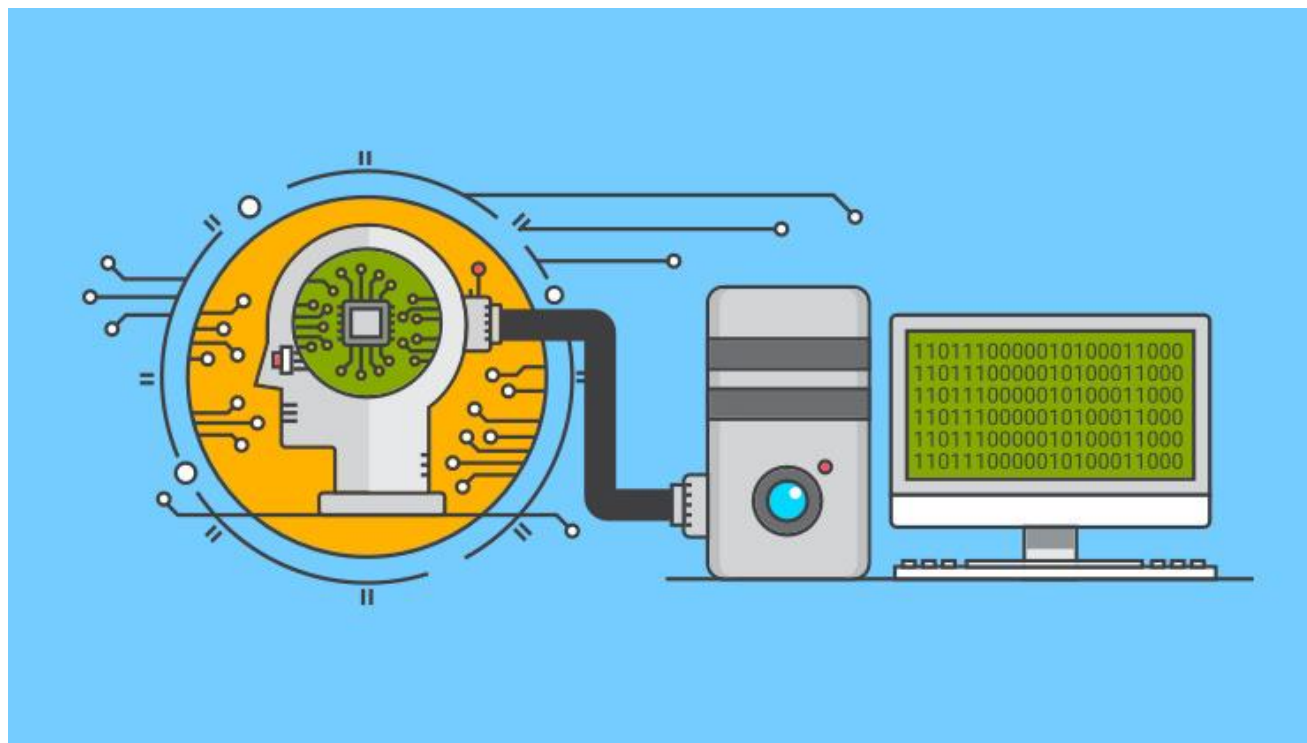
5 rows × 6223 columns

data_espectro.tail()

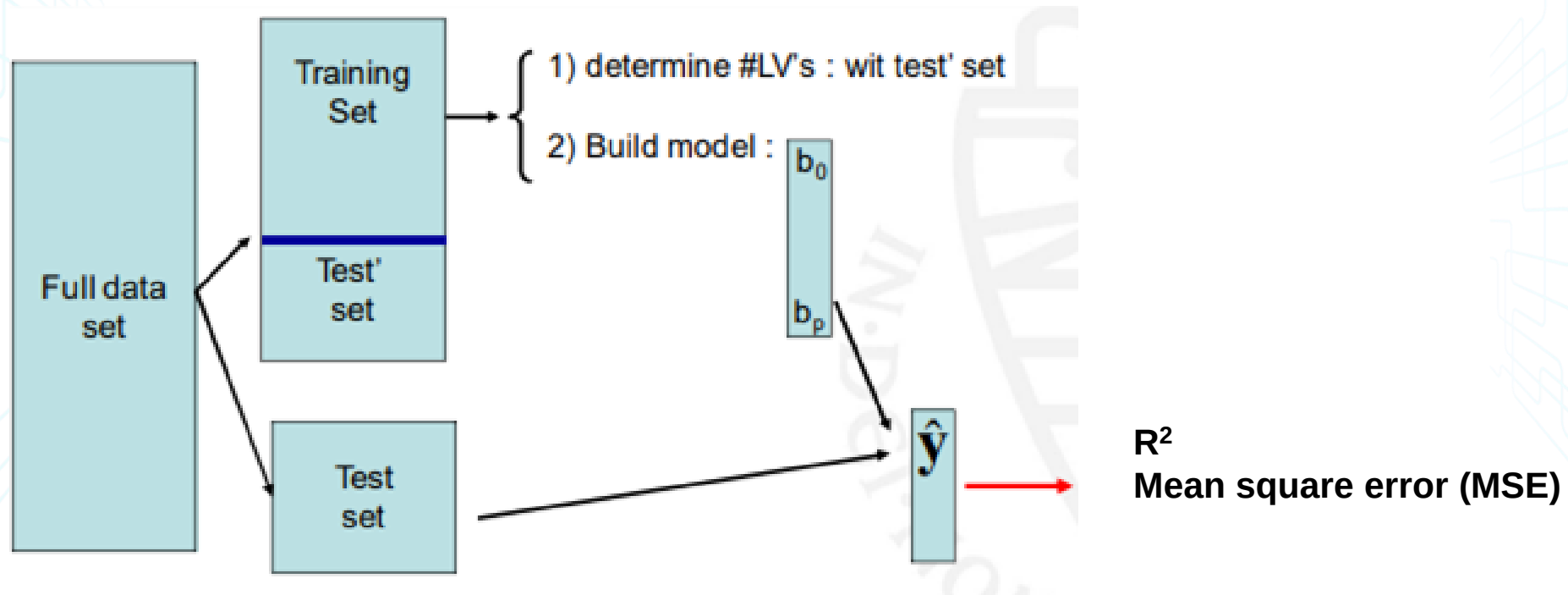
M1R1	1000.409	1000.891	1001.373	1001.855	1002.337	1002.819	1003.301	1003.783	1004.266	1004.748
355	0.608953	0.607907	0.606785	0.605677	0.604657	0.603747	0.602919	0.602121	0.601317	0.600521
356	0.586923	0.585866	0.584779	0.583745	0.582824	0.582016	0.58127	0.580514	0.5797	0.578839
357	0.554923	0.554074	0.553155	0.552238	0.551384	0.55061	0.549888	0.549173	0.548435	0.547685
358	0.513332	0.512602	0.511824	0.511053	0.510333	0.509674	0.509047	0.508412	0.507744	0.507056

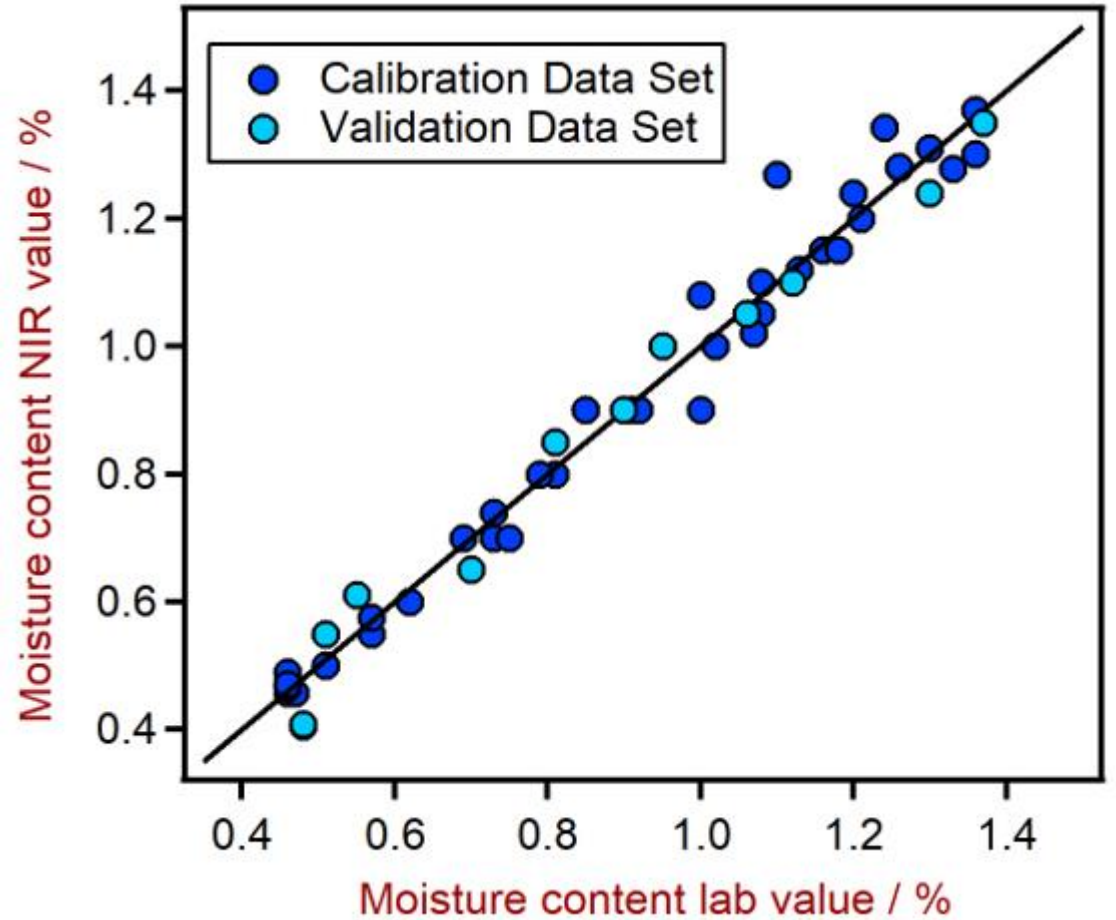
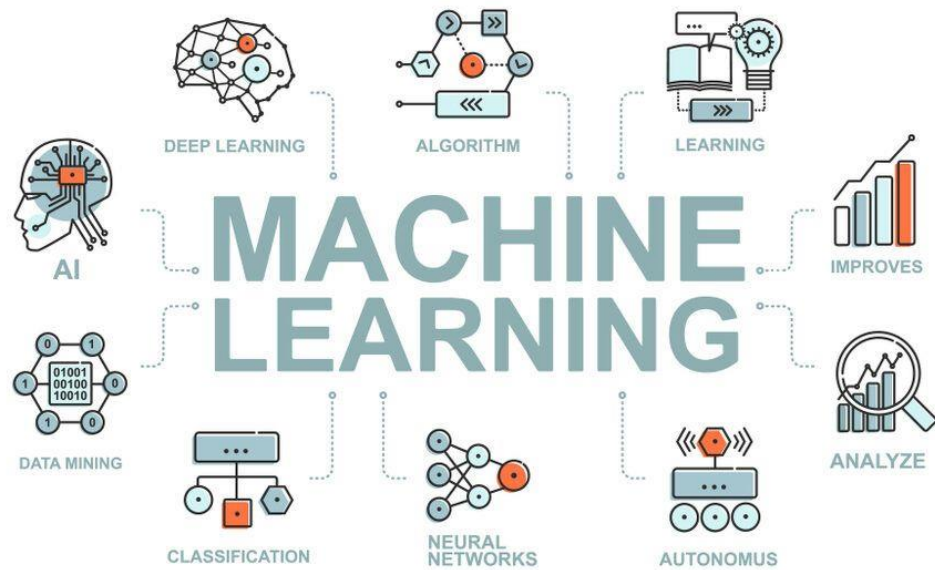


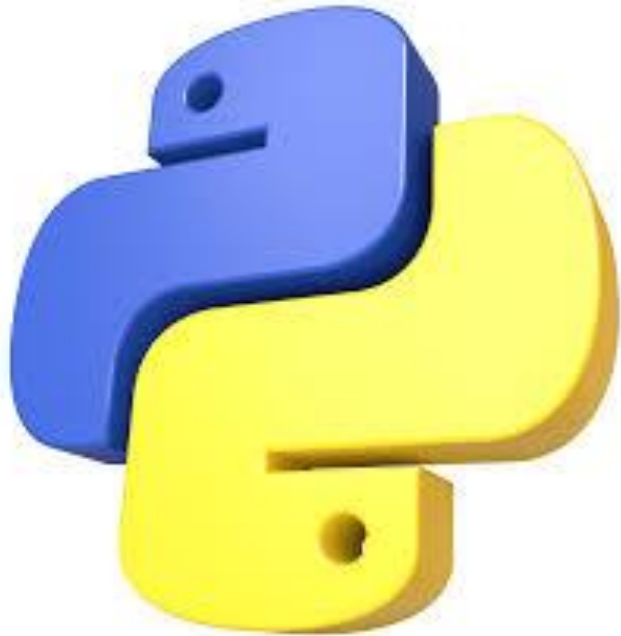
Machine Learning en quimiometría aplicada a datos NIRS (Near Infrared Spectroscopy)



Machine Learning en quimiometría aplicada a datos NIRS con PLS-R (Partial Least Squares Regression)





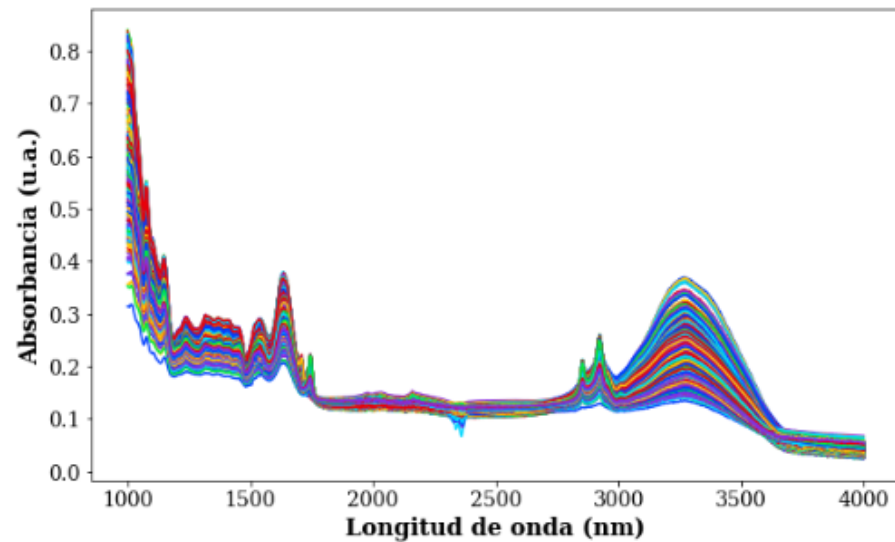


¿Cuál es su utilidad?



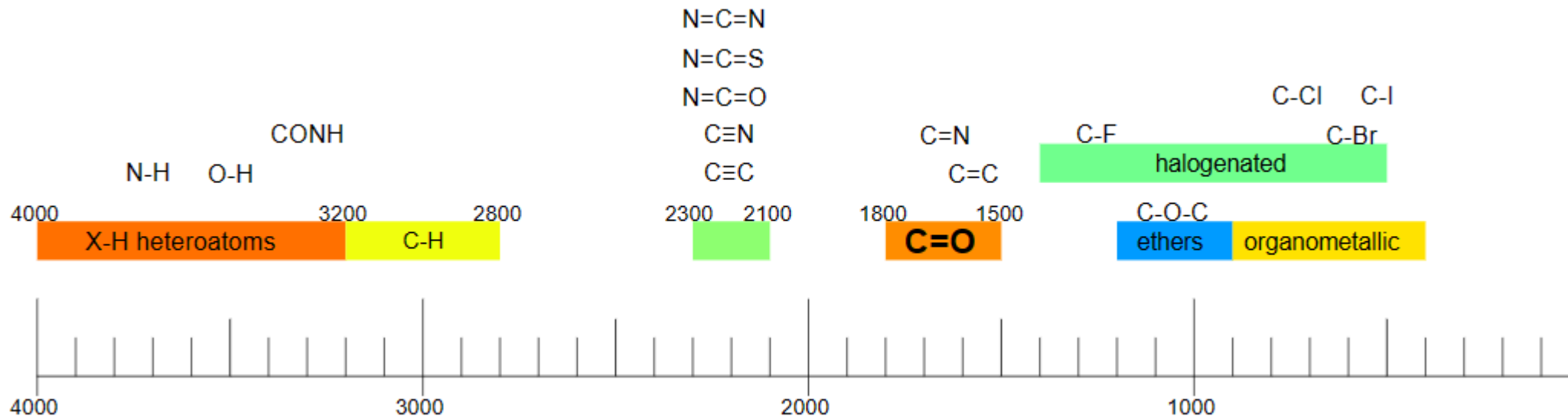
Oliva 23%
Girasol 77%

¿Cuál es su utilidad?



Oliva 23%
Girasol 77%

¿Cuál es su utilidad?



Lista de las principales bandas de espectroscopía de infrarrojos. Por ejemplo, el grupo carboxilo contendrá una banda **C=O** a 1700 cm^{-1} y una banda **OH** a 3500 cm^{-1} (grupo total —COOH). Números de onda listados en cm^{-1} .

Regiones:

Un espectrógrafo se interpreta a menudo como que tiene dos regiones.

Región del grupo funcional $\geq 1500\text{ cm}^{-1}$ En la región funcional hay uno a unos pocos canales por grupo funcional.

Región fingerprint o de huellas dactilares $< 1500\text{ cm}^{-1}$ En la región de huellas dactilares hay muchos canales que forman un patrón intrincado que se puede usar como una huella dactilar para determinar el compuesto

¿Cuál es su utilidad?



REDUCE



THANKS



gerencia@dataengineeringperu.com

jaod_05@hotmail.com

data.engineering.peru@gmail.com



GitHub

<https://github.com/Jechu2>



www.linkedin.com/in/jesús-alfredo-obregón-domínguez-29070766



<https://orcid.org/0000-0002-0664-1568>



<https://www.facebook.com/jesusalfredo.obregondominguez/>

