

Un Estudio sobre la Implantación en Línea de un Sensor NIRS en una Industria Agroalimentaria

Pedro Vallesquino Laguna

Departamento de Bromatología y Tecnología de los Alimentos

Universidad de Córdoba

bt1valap@uco.es

abril de 2012

PREFACIO

El presente documento ha sido elaborado teniendo en cuenta los trabajos realizados por el autor durante las investigaciones que dieron lugar a la publicación de obras como *'How often do references need to be measured when using a near infrared diode array spectrometer'* (Vallesquino-Laguna et al, 2010) o *'Diseño y Programación de un Software Experto Aplicable al Control de Calidad "NIRS Online" en la Fábrica de Piensos de la Cooperativa COVAP'* (Vallesquino-Laguna, 2010), Trabajo Fin de Máster dirigido por D. Augusto Gómez Cabrera, Catedrático del Departamento de Producción Animal de la Universidad de Córdoba. Dichos trabajos se realizaron en el marco del Proyecto CTA 06/105, en colaboración con la Cooperativa del Valle de los Pedroches (COVAP) y el Departamento de Producción Animal de la Universidad de Córdoba. A todas las entidades mencionadas, y especialmente a D. Augusto Gómez Cabrera, deseo trasladar mi profundo agradecimiento.

Al margen de lo anterior, y en relación con el texto, se advierte que en lo que sigue es posible que algunas palabras no sigan las comunes reglas de ortografía y puntuación del castellano, pues corresponden a variables o instrucciones de programación (normalmente identificadas y definidas a lo largo del documento) que por la sintaxis del lenguaje usado no pueden llevar acento, están expresadas en inglés, o presentan otras irregularidades ortográficas.

Índice

1) Introducción	4
2) Materiales y métodos	7
2.1) Primera serie de ensayos.....	7
2.2) Segunda serie de ensayos.....	10
2.3) Tercera serie de ensayos	10
3) Resultados y discusión	15
3.1) Primera serie de ensayos.....	15
3.2) Segunda serie de ensayos.....	21
3.3) Tercera serie de ensayos	23
3.3.1) Información espectral de partida.....	23
3.3.2) Primeros análisis PCA.....	27
3.3.3) Comportamiento de otras componentes principales	31
4) Conclusiones	35

ANEXOS

Anexo 1: Arquitectura y funcionamiento del sistema	38
A1.1) Arquitectura	38
A1.2) Funcionamiento del sistema de control	43
A1.2.1) Gestión de la información espectral y de referencia	47
A1.2.1.1) Periodo de entrenamiento o calibración	47
A1.2.1.2) Periodo de predicción o control	48

Anexo 2: Ficheros de almacenamiento ligados a

NIVEL_0L1.m	53
A2.1) Fichero “BASIC_DATA_1.mat”	54
A2.1.1) ENTRADA	54
A2.1.2) INSTALACION	56
A2.1.3) PARAM_TRAT	57
A2.2) Fichero “PLANT_COVAP.xls”	59
A2.2.1) HOJA “INGREDIENTES”	60
A2.2.2) HOJA “PAR_NUTRITIVOS”	61
A2.2.3) HOJA “ESTADISTICOS”	62
A2.2.4) HOJA “LOTE”	62
A2.3) Ficheros “*.xls” creados por NIVEL_0L1.m	63
A2.4) Fichero “scada.txt”	64
A2.5) Fichero “*.txt” servido por la sala de control	65
A2.6) Ficheros “*.SPC” servidos por el instrumento NIR	67
A2.7) Ficheros de salida por pesada (“*.mat”)	68
A2.7.1) GLOBAL_DATA.....	69
A2.7.2) PAR_NUTR.....	71
A2.7.3) SAL_ESTAD	72
A2.7.4) SAL_OTROS	73
A2.8) Ficheros de matrices de espectros (“*.mat”)	74
A2.9) Ficheros de modelos PCA (“*.mat”)	75
A2.9.1) MODELO_PCA.detail	76
A2.9.2) MODELO_PCA.loads	77
A2.9.3) MODELO_PCA.centro y MODELO_PCA.sigma.....	78
A2.9.4) MODELO_PCA.T_lim, MODELO_PCA.Hglim y MODELO_PCA.Hvlim	78

Anexo 3: Ficheros de almacenamiento ligados a “control_menu.m”	80
A3.1) Fichero “B_DATA(2).mat”	80
A3.1.1) RUTA_SC	81
A3.1.2) LIMITS	84
A3.2) Fichero “ver.mat”	84
A3.3) Fichero “lista.mat”	85
A3.4) Ficheros “*.xls” gestionados por control_menu.m	87
A3.5) Ficheros de almacenamiento gráfico	88
Anexo 4: Relación de subprogramas ligados a “NIVEL_0L1.m”	90
Anexo 5: Relación de subprogramas ligados a “control_menu.m”	90
Anexo 6: Configuración del programa Cora	91
A6.1) Configuración de directorios y aspecto inicial	91
A6.2) Configuración del modo de captura	94
A6.3) Configuración de los parámetros de captura	95
A6.4) Configuración de los nombres de los ficheros *.SPC	97
Anexo 7: Bibliografía	99

1) Introducción

Como es bien sabido, la espectroscopia en el infrarrojo cercano (NIRS) es una técnica no destructiva¹ que ha sido empleada en áreas diversas, (Fontán et al., 2011; He et al, 2007; Pereira et al., 2008; Roggo et al., 2007; Cleve et al., 2000; Paul, 2004; Pérez-Marín et al., 2004; Fernández-Ahumada et al. 2008), para medir parámetros analíticos como carbono, nitrógeno, materia orgánica o pH en suelos, naftalina y octanos en gasolina; paracetamol, esteroides o cafeína en medicinas; algodón, polyester o fibras en textiles; proteína, grasa o humedad en alimentos (para humanos o animales), etc.

Dependiendo del caso que se trate, la selección de un espectrofotómetro dado para medir los parámetros antes señalados suele estar condicionada por factores como el rango de longitudes de onda a medir, la resolución y precisión, velocidad en la adquisición espectral, condiciones ambientales de uso, vida útil, coste y garantía, etc. No obstante, es evidente que otro de los factores importantes que también debe ser tenido en cuenta a la hora de elegir un instrumento es el método usado por el mismo para llevar a cabo su control interno (paso de referencias).

En este punto, podemos aclarar que para el caso de medidas “at line”, en el que el número de espectros tomados en un solo día suele ser pequeño (del orden de cientos a lo sumo), es posible la utilización de espectrofotómetros con toma manual de referencias, pues ello no suele entorpecer demasiado el proceso de medida dado que las referencias son tomadas cada cierto tiempo (Saeys, 2006), (Saeys et al. 2005), (Nicolai et al., 2007), (Alamar et al. 2007).

¹ Como posibles consultas de referencia, en (Naes et al., 2007), (Roberts et al., 2004) o en (Burns y Ciurczak, 2007) puede encontrarse una descripción más detallada de las bases y aplicaciones de esta tecnología.

En aplicaciones industriales “on-line” (control sobre la propia línea de producción), en las que es necesario tomar y gestionar en tiempo real miles de espectros al día, el proceso de medida requiere (casi inevitablemente) que el espectrofotómetro empleado tenga automatizadas prácticamente todas sus funciones, incluida la del paso de referencias por algún mecanismo (interno o externo). Este aspecto, junto con el relacionado con la elaboración de ecuaciones robustas, es posiblemente el que más haya condicionado la implantación de la tecnología NIRS a nivel “on line”, a pesar del interés que pudiera suscitar su aplicación.

Si bien es constatable que avances muy recientes en este campo (Carl Zeiss, 2011) han puesto a disposición de empresas e investigadores nuevo instrumental (con paso automático de referencias) con el que poder llevar a cabo el control “on-line” de materias primas y productos, no es menos cierto que en la actualidad existen en el mercado, y en manos de muchos usuarios, un buen número de equipos que no cuentan con esta tecnología, y que podrían ser aprovechados para el control “on line” de procesos si se llevaran a cabo los ajustes oportunos.

Considerando lo anterior, con este trabajo se presenta un estudio (basado en las actividades de investigación desarrolladas por el autor) que se encuentra enmarcado dentro del Proyecto de I+D+I titulado: “Automatización del Control de Calidad en Fabricación de Mezclas y Piensos en la Cooperativa COVAP Mediante Tecnología NIRS” (COVAP, 2006).

El citado Proyecto ha tenido como objetivo general lograr el establecimiento de un sistema de control de calidad instantáneo, preciso y no destructivo (basado en la tecnología NIRS) que cubriese toda la cadena de producción de piensos y de mezclas de COVAP. Además, este sistema debía permitir el control de todos los productos implicados (materias primas y productos finales) para facilitar la toma de

decisiones en tiempo real sobre cuestiones relacionadas con la aceptación (o rechazo) del producto o con su valoración nutricional.

Dado el interés del Proyecto, se puede destacar que el mismo ha contado con la financiación del Centro para el Desarrollo Tecnológico Industrial (CDTI) y de la Corporación Tecnológica de Andalucía (CTA). Otras entidades que han colaborado en su desarrollo han sido la empresa INELPRO y el Servicio Regional de Investigación y Desarrollo Agroalimentario del Principado de Asturias (SERIDA).

En el contexto planteado, con el Trabajo que aquí se detalla se ha pretendido dar respuesta a algunos de los retos integrados en la consecución del Proyecto general antes citado. Concretamente, se ha abordado la implementación “on line” (en la fábrica de piensos de COVAP) de un espectrofotómetro de red de diodos cuyo paso de referencias puede ser realizado de forma manual. El objeto futuro de esta actividad será la de controlar la calidad de los piensos compuestos fabricados por esta empresa (dejando en todo momento registro de cada control con el fin de mantener la trazabilidad). Para hacer posible lo anterior, se ha procedido primero a analizar en laboratorio la estabilidad del instrumento bajo dos formas de manejo diferentes (Vallesquino et al., 2010), pasando después a desarrollar un software de control capaz de gestionar y registrar en tiempo real el control de calidad de los piensos producidos (Vallesquino-Laguna, 2010). Gracias a esta aplicación informática, se ha podido capturar de forma automática (con el espectrofotómetro ya instalado en su ubicación definitiva) valiosa información espectral de muestras de pienso variadas.

En los apartados que siguen se procede a presentar la metodología seguida, y los resultados más relevantes obtenidos, a lo largo de los ensayos que se han realizado sobre la temática antes referida. Repartida en diferentes anexos, se incluye asimismo detallada información relativa al software de control que se ha creado.

2) Materiales y métodos

Los ensayos relacionados con este trabajo fueron desarrollados con un espectrofotómetro de infrarrojo cercano modelo Corona 45 VISNIR de Carl Zeiss. Las principales características de este instrumento quedan resumidas en la tabla 1 de acuerdo con las especificaciones técnicas aportadas por el fabricante (Carl Zeiss, 2004).

Característica	Especificación
Tipo de espectrómetro	Red de diodos
Rango de observación	400-1680 nm
Resolución de lectura	2 nm
Errores por ruido (con medidas de 1s)	< 0.2%
Fuente de luz	Lámpara halógena de 10V /18W
Duración de la lámpara	2000 h (aproximadamente)
Cabezal de medida	0° / 45° circular
Rango operativo de temperaturas	0-40°C
Velocidad de medida	50 medidas/segundo (máximo) con puerto RS 422
Periodo de calibración	< 1h

Tabla 1. Características del equipo Corona 45 VISNIR

2.1) Primera serie de ensayos

Para llevar a cabo las medidas oportunas (Vallesquino et al., 2010), este espectrómetro fue instalado provisionalmente (en laboratorio) sobre un módulo estacionario fabricado por la empresa J. Haldrup a/s de Løgstør (Dinamarca) que

permite las medidas espectrales sobre un punto fijo. En las figuras 1.a y 1.b se muestra la apariencia de este módulo, compuesto por una plataforma giratoria que está emplazada sobre una cinta transportadora. Para los propósitos de estos ensayos, la mencionada cinta fue usada en modo estático y sobre ella se dispuso una cápsula prismática (diseñada para evitar los cambios de humedad) en la que se introdujeron unos 50 gramos de pienso compuesto. El funcionamiento del espectrómetro fue asistido por un PC (con procesador Intel Pentium IV y 512 Megabytes de memoria RAM) en el que estaba instalado el software de manejo básico del Corona 45 VISNIR (programa CORA de Carl Zeiss, 2004).



Figura 1.a: Espectrómetro midiendo



Figura 1.b: Espectrómetro sin medir

La metodología seguida en esta serie de ensayos fue como sigue: el espectrofotómetro y la cápsula de pienso fueron llevados al laboratorio 24 horas antes de comenzar las medidas (para equilibrar su temperatura con la de la sala). El instrumento fue encendido 30 minutos antes de tomar cualquier espectro para lograr un funcionamiento estable (sobre la idoneidad de esta decisión volveremos más tarde). Tras esto, las referencias blanca y negra (ver figuras 2.a y 2.b) fueron pasadas manualmente sólo una vez, y las mismas sirvieron para ajustar todos los demás espectros que serían tomados durante los siguientes 4 días. En este periodo el espectrómetro permaneció encendido y se midieron espectros, sobre la capsula

de pienso, a intervalos regulares de 0,5 ~ 1 hora durante el día. El valor de la absorbancia ($\log 1/ R$) para cada lectura óptica, a cada longitud de onda (λ_i), fue calculada como sigue²:

$$\log\left(\frac{1}{R}\right)=\log\left(\frac{R_{blanca}-R_{negra}}{R_{muestra}-R_{negra}}\right), \quad (1)$$

en donde R_{blanca} y R_{negra} son, respectivamente, la intensidad de la radiación remitida por las referencias blanca y negra del instrumento, y $R_{muestra}$ es la correspondiente intensidad procedente de la muestra que se analice.



Figura 2.a: referencia blanca

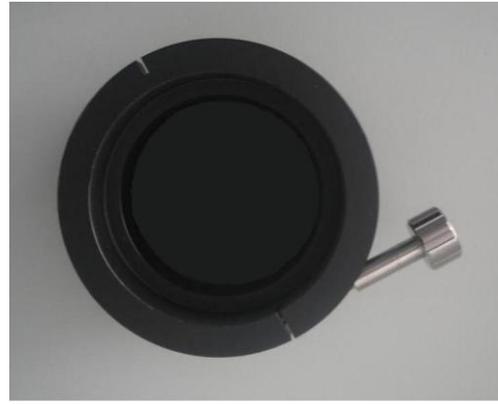


Figura 2.b: referencia negra

Para llevar a cabo cada observación, la plataforma giratoria del Haldrup era rotada hacia abajo hasta una posición estable, justo por encima de la muestra (a unos 30 mm, ver figura 1.a) y siempre sobre el mismo punto. Tras cada observación, el instrumento era rotado hacia arriba hasta otra posición de equilibrio (ver figura 1.b) para evitar que la fuente de luz pudiera alterar la capsula de pienso. Durante

² El paso de referencias (o calibración del instrumento) consiste en acoplar a la lente del mismo las referencias blanca y negra tomando lectura, por separado, de los espectros asociados a dichas referencias. Con esta información espectral el equipo ya es capaz, como se deduce de la ec. (1), de medir correctamente cualquier otra muestra que sea requerida.

estos ensayos la temperatura del laboratorio permaneció constante en torno a 19 ~ 20 °C, y la humedad relativa³ osciló entre el 40 ~ 50 %.

2.2) Segunda serie de ensayos

El procedimiento aplicado en estos experimentos fue similar al anterior (Vallesquino et al., 2010), y se emplearon los mismos materiales, pero en este caso el proceso de ensayo comenzó dos días después de acabar la primera serie (durante los cuales el espectrofotómetro estuvo apagado).

Lo primero que se hizo en este caso fue encender el instrumento 24 horas seguidas antes de tomar cualquier medida. Terminado este periodo de estabilización, las referencias blanca y negra fueron pasadas cada hora y la capsula de pienso fue medida cada 20 minutos, aproximadamente, siguiendo el mismo método antes descrito (ver figuras 1.a y 1.b). De este modo, la muestra se midió 3 veces entre cada lectura de las referencias blanca y negra, y siempre una de estas medidas fue realizada justo después de tomar dichas referencias. El tiempo empleado en estos ensayos fue de unas 10 horas, a lo largo de las cuales la temperatura del laboratorio permaneció casi constante (entre 19 ~ 20 °C) y la humedad relativa osciló entre el 40 ~ 50 %.

2.3) Tercera serie de ensayos

Esta serie de medidas fue realizada ya en planta (Vallesquino-Laguna, 2010), en la ubicación definitiva en la que el instrumento debía quedar instalado, y se caracterizaron por ser observaciones “on line” sobre el normal proceso de

³ En las tres series de ensayos descritas en este apartado metodológico la temperatura (T) y la humedad relativa (H_r) fueron medidas con un higrómetro digital con precisión del ±3 % con H_r y de ±1 °C con T. Su resolución de lectura fue del 0,5 % con H_r y de 0,1 °C con T.

fabricación de piensos compuestos que diariamente realiza la empresa propietaria de la planta (COVAP).

En este momento conviene notar que en la rutina de fabricación de esta empresa se suelen producir a lo largo del día diferentes lotes de pienso que normalmente están formados, cada uno de ellos, por diversas pesadas que tienen igual formulación (composición teórica). Cada pesada suele contener unos 6000 kg de pienso (con diferentes ingredientes) y un lote puede estar compuesto fácilmente por 10 ~ 20 pesadas (en función del encargo que se tenga que abastecer). Dependiendo de la demanda, no es raro encontrar que entre la fabricación de lotes de piensos distintos puedan transcurrir periodos de 0,5 ~ 1 hora, e incluso más.

En las figuras 3 y 4 se muestra el punto de control, en el que ha quedado instalado el espectrofotómetro empleado, y desde el que son tomadas las medidas espectrales en una de las líneas de fabricación de esta planta.

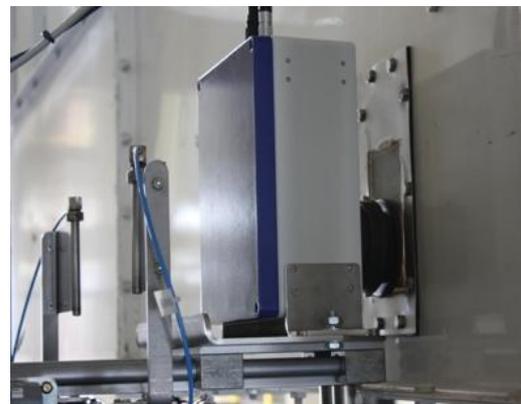


Figura 3: vista general de la instalación del espectrofotómetro

Puede verse que el mismo está montado sobre una plataforma metálica que está soportada por un pilar de acero de unos 3 m de altura y sección de 160mm*160mm. Conectado al espectrofotómetro hay un autómata (OMRON CJ1M CPU11) con el que se tiene previsto controlar las labores de encendido y apagado del instrumento así como el desplazamiento del equipo cuando sea necesaria la toma manual de referencias. Su uso no se descarta también para otras funciones en posibles mejoras futuras.



4.a



4.b

Figura 4: detalles de la plataforma de soporte y la ventana de control

En las figuras 4.a y 4.b se presenta con más detalle la zona de ensayo. Puede destacarse que en la misma se ha dispuesto una ventana de control, a través de la cual se realizan las medidas, que está hecha de vidrio extra-claro (espesor 6 mm y factores luminosos: $Tl = 91$, $RIE = 8$ y $Rll = 8$) y que tiene unas dimensiones de 250mm*100mm. Dicha ventana está insertada en un canal metálico rectangular de unos 5 m de largo (con sección aproximada de 1000mm*500mm) por el que circulan las pesadas de pienso compuesto (una vez que han salido de la mezcladora de ingredientes). En el momento que una pesada de pienso se encuentra pasando por este canal se cumple, como promedio, que el flujo másico (que atraviesa la sección de paso en la que está instalado el espectrofotómetro) es de unos 1700 kg de pienso/minuto, por lo que una pesada completa requiere de unos 3,5 minutos para atravesar dicha sección. Asimismo, entre pesadas consecutivas (de un mismo

lote) suelen transcurrir unos 3 ~ 5 minutos (dependiendo de la marcha del proceso), por lo que la fabricación de un lote dado no tiene a priori una duración fija.

Dado que la intención final de todo este dispositivo es la de controlar de forma eficaz la calidad de los piensos fabricados, fue necesario programar un software experto capaz de gestionar y registrar en tiempo real toda la información asociada al proceso de control. Por la importancia que ha tenido el mismo en la obtención de la información que más adelante será mostrada, en los anexos que se adjuntan en este documento se detalla la arquitectura y funcionamiento de esta aplicación así como la relación de programas y ficheros que la componen. Notar en este punto que como lenguaje de programación se ha empleado MATLAB⁴ 7.0 por su versatilidad, sencillez y amplio soporte en línea.

De forma concisa, el esquema de organización del sistema creado responde a un modelo como el que se muestra en la figura 5. En tal esquema se aprecia que desde un servidor de COVAP parte la orden de fabricación de una determinada fórmula (con un número dado de ingredientes en diferentes porcentajes), y esta fórmula sirve de referencia para llevar a cabo tareas de cálculo posteriores por el PC que gestiona este sistema control. Dependiendo de la información espectral recogida por el espectrofotómetro en cada momento, existe un conjunto de subprogramas que canalizan, gestionan y registran esa información (para mantener la trazabilidad), facilitando al instante una serie de resultados estadísticos (relacionados con la calidad del pienso fabricado) que permiten tomar una decisión.

Haciendo uso de este software, y de los procedimientos desarrollados en él, ha sido posible la realización de esta serie de ensayos en la que se han extraído de forma automática medidas espectrales de diferentes lotes de piensos que fueron

⁴ Si se desea, en Mathworks (2011) puede encontrarse una descripción extensa sobre el empleo y propiedades de este programa.

fabricados en tres días consecutivos. Teniendo presente las especificaciones técnicas del instrumento (ver tabla 1) y de su aplicación de apoyo (Carl Zeiss, 2004), la captura de espectros se ajustó a una tasa aproximada de 90 medidas/pesada. Puesto que el proceso de producción de la planta está adecuado a la demanda existente, las observaciones realizadas tuvieron que adecuarse al ritmo de fabricación de las pesadas, que en general se caracterizó por ser discontinuo. Como en la serie de experimentos anterior, el instrumento fue encendido 24 horas antes de tomar cualquier medida y desde ese momento no fue apagado hasta finalizar todas las observaciones. En lo que a condiciones ambientales se refiere, la temperatura del lugar en el que fueron realizados estos ensayos fue bastante estable (entre 20 ~ 23 °C) y la humedad relativa osciló entre el 53 ~ 66 % (ambiente similar al registrado en los ensayos precedentes).

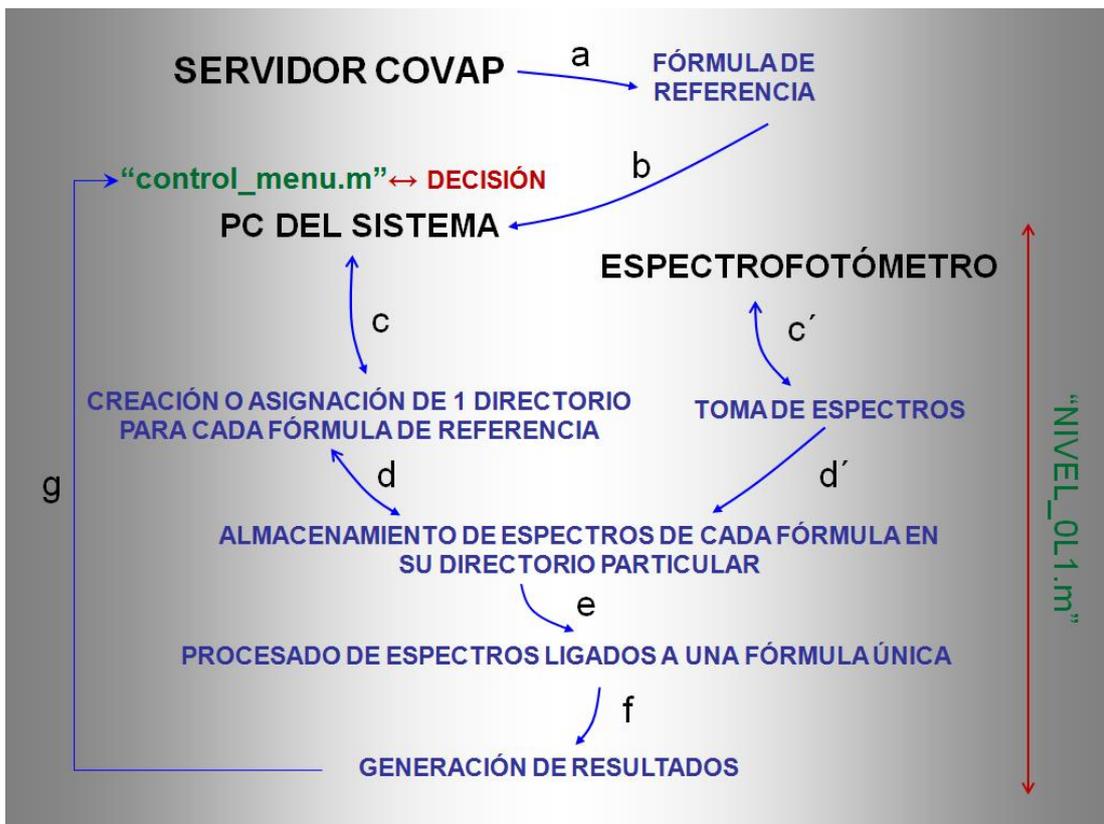
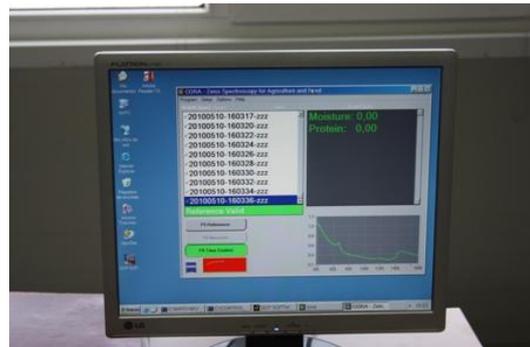


Figura 5: esquema del software de control asociado a esta serie de ensayos

En las figuras 6.a y 6.b se muestran como ejemplo 2 fotografías del PC del sistema trabajando ya en rutina (en la 6.a puede verse el software que se ha diseñado al uso y en la 6.b la ejecución del programa CORA). Dicho PC se encuentra alojado en la sala de control de piensos de COVAP y tiene por el momento un procesador Intel Pentium 4 (Core 2 Duo) con 4 Gigabytes de memoria RAM.



6.a



6.b

Figura 6: imágenes del PC del sistema situado en la sala de control

3) Resultados y discusión

Se muestran a continuación los resultados y consideraciones de interés más relevantes ligadas a las tres series de ensayos ya indicadas en el apartado metodológico.

3.1) Primera serie de ensayos

La apariencia de las medidas en la región NIR (infrarrojo cercano) durante las primeras 45 horas de ensayo es mostrada en la figura 7, en la que son representados 36 espectros. Con el fin de centrar la atención en dicha región, y dado que los espectros se vuelven “ruidosos” con el equipo usado a partir de los 1640 nm, sólo se tendrá en consideración el rango espectral comprendido entre los 1100 ~ 1640 nm.

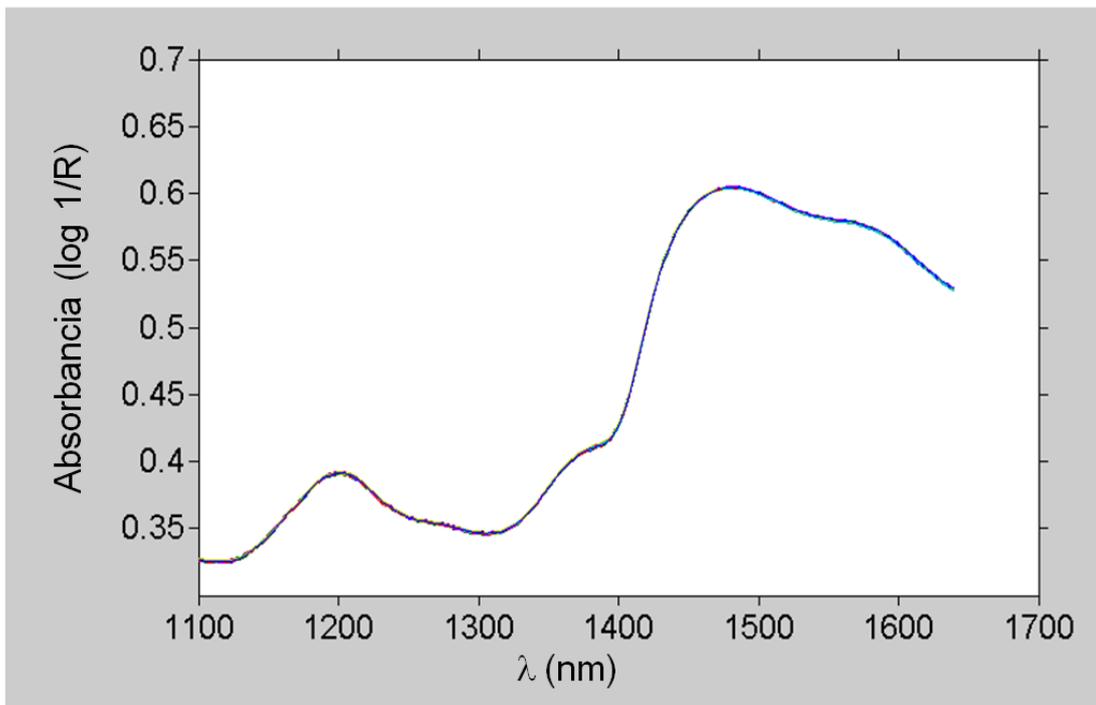


Figura 7: espectros NIR medidos durante las primeras 45 horas de ensayo

Es de notar en la figura anterior que todos los espectros son muy similares, a pesar de que las referencias blanca y negra sólo han sido tomadas una sola vez (al principio del ensayo). Si el espectro medio es tomado como línea base, y es restado a todos los demás, es posible estimar el orden de magnitud de las diferencias reales existentes entre todas las lecturas realizadas. Con este propósito, en la figura 8 son presentadas algunas de estas diferencias (las más significativas) para no perder claridad en la exposición. Tras el análisis de las mismas se constata que su orden de magnitud es normalmente inferior a $2 \cdot 10^{-3}$.

Junto a las diferencias anteriores, se determinó el parámetro RMS (“root mean square”) con esta secuencia de medidas. Dicho parámetro equivale, en este caso, a la desviación típica (entre cualquier espectro j y el espectro medio) de las diferentes absorbancias registradas a cada longitud de onda (λ_i). Su valor fue calculado como:

$$RMS_j = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{i=N} (Y_{ij} - \bar{Y}_i)^2}{N}}, \quad (2)$$

en donde RMS_j es el valor de RMS para el espectro j , N es el número de longitudes de onda que tiene cada espectro (271 en estos ensayos), Y_{ij} es la absorbancia del espectro j a la longitud de onda λ_i , e \bar{Y}_i es la absorbancia media (del conjunto de espectros tomados) a la longitud de onda λ_i .

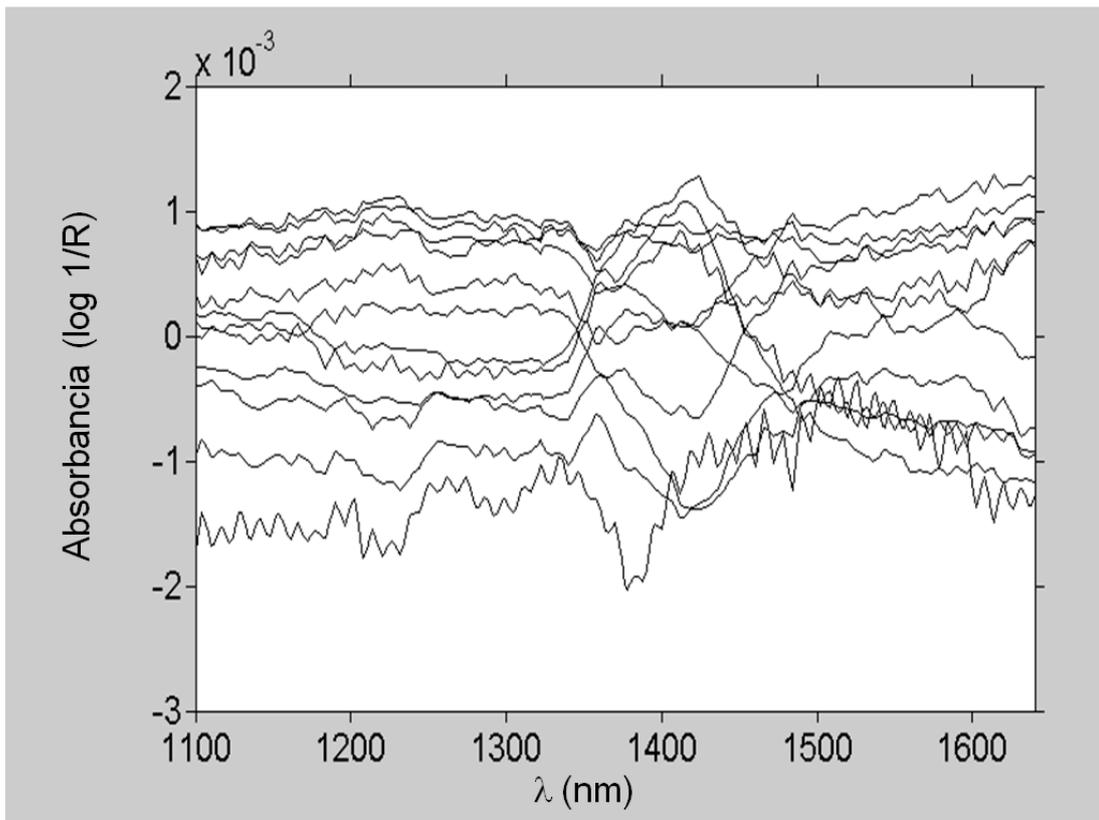


Figura 8: diferencias espectrales durante las primeras 45 horas de ensayo

En la figura 9 se muestran los valores de $RMS \cdot 10^6$, en función del tiempo, para las primeras 45 horas de ensayo. Debe notarse en esta figura que los intervalos de tiempo sin puntos se deben a horas no laborables, principalmente por la noche,

en las que el instrumento estuvo encendido aunque no se tomó medida alguna. Para esta serie de ensayos el valor medio de $\text{RMS} \cdot 10^6$ se situó en torno a 645.

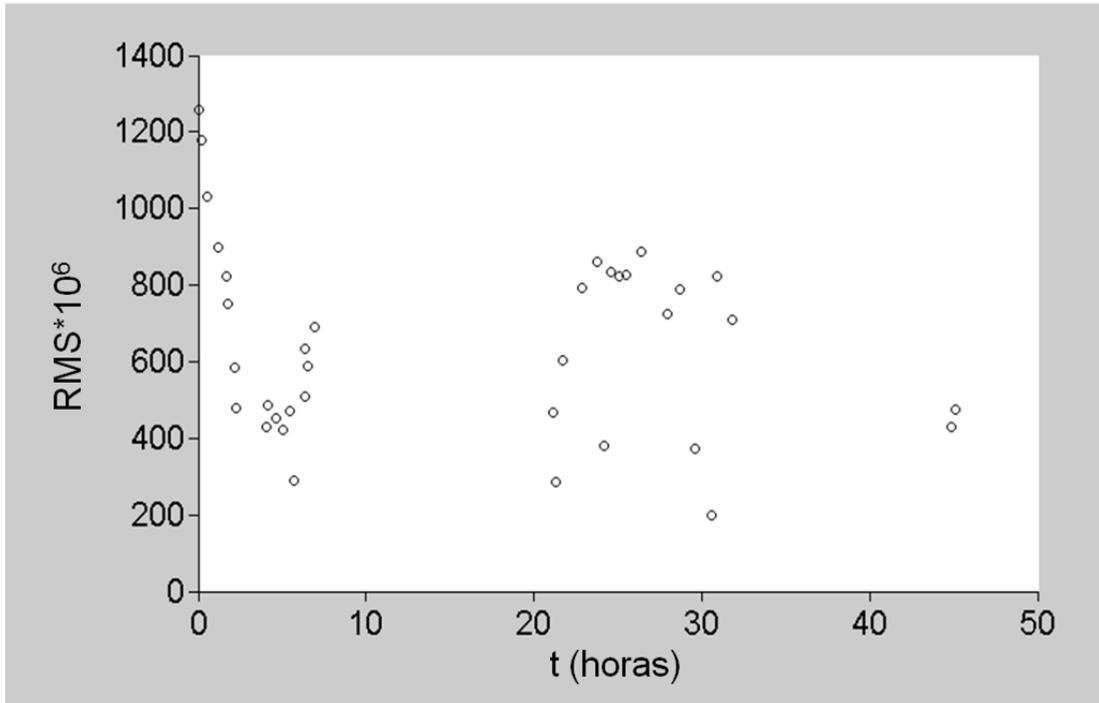


Figura 9: valores de $\text{RMS} \cdot 10^6$ para las primeras 45 horas de ensayo

Como referencia comparativa para los valores presentados en las figuras anteriores, se puede indicar que en otros ensayos y experiencias con este instrumento (sin publicar), en los que se midieron más de 140 muestras (con 10 repeticiones cada una de ellas pero no sobre el mismo punto), se obtuvieron como media valores de $\text{RMS} \cdot 10^6$ cercanos a 15000, y las diferencias máximas de absorbancia (respecto del espectro medio) fueron del orden de $1,4 \cdot 10^{-1}$ (70 veces superiores a la mayor diferencia mostrada en la figura 8), lo que viene a sugerir que son despreciables las desviaciones encontradas en la serie de ensayos tratada en este apartado.

Tras esta primera parte del ensayo, la muestra de pienso fue movida accidentalmente (unos pocos milímetros) y los espectros cambiaron ligeramente.

Para evitar problemas posteriores, la capsula de pienso fue fijada de forma más segura a la cinta del Haldrup y el espectrofotómetro fue reiniciado, por lo que durante unos tres minutos la fuente de luz estuvo apagada. Después de esto, las medidas continuaron durante 48 horas más sin tomar referencia alguna (se siguieron empleando las referencias tomadas al principio de todo).

En la figura 10 se presentan algunas diferencias representativas entre los valores de absorbancia de los espectros medidos en este nuevo periodo de ensayos respecto del espectro medio registrado en dicho periodo.

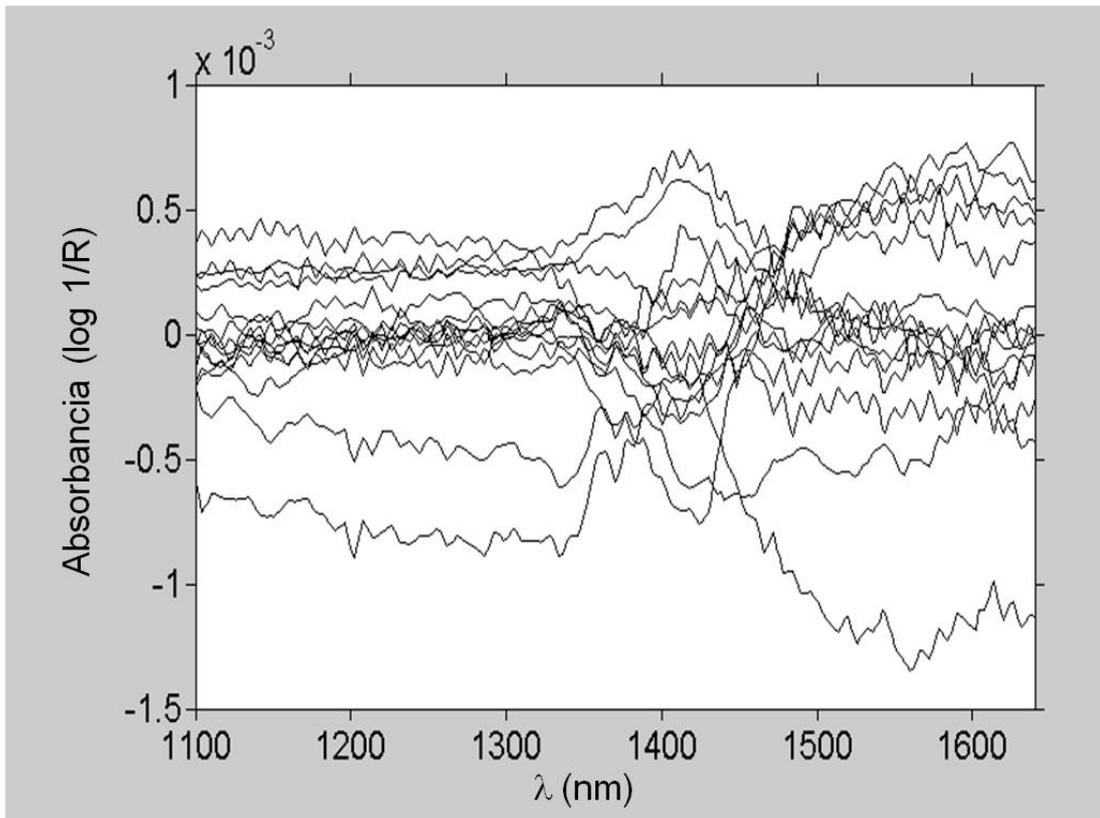


Figura 10: diferencias espectrales en el periodo de ensayo de 48 horas

Como antes, la variabilidad observada tiene una estructura errática similar a la que puede verse en la figura 8, y su orden de magnitud es semejante (no mayor de $1,5 \times 10^{-3}$). Puede destacarse de ambas figuras (8 y 10) los patrones en "V" que se

produce en la región cercana a los 1400 nm. Es probable que esta tendencia se deba a los cambios de humedad que se produjeron en el interior del laboratorio (que osciló entre el 40 ~ 50%) y al espacio de aire (de unos 30 mm) existente entre la muestra y el espectrómetro.

En la figura 11 se muestra la evolución del parámetro RMS (ver ec. 2) en función del tiempo. Como en la primera secuencia de ensayos, no se tomaron medidas espectrales durante la noche, aunque el equipo permaneció encendido.

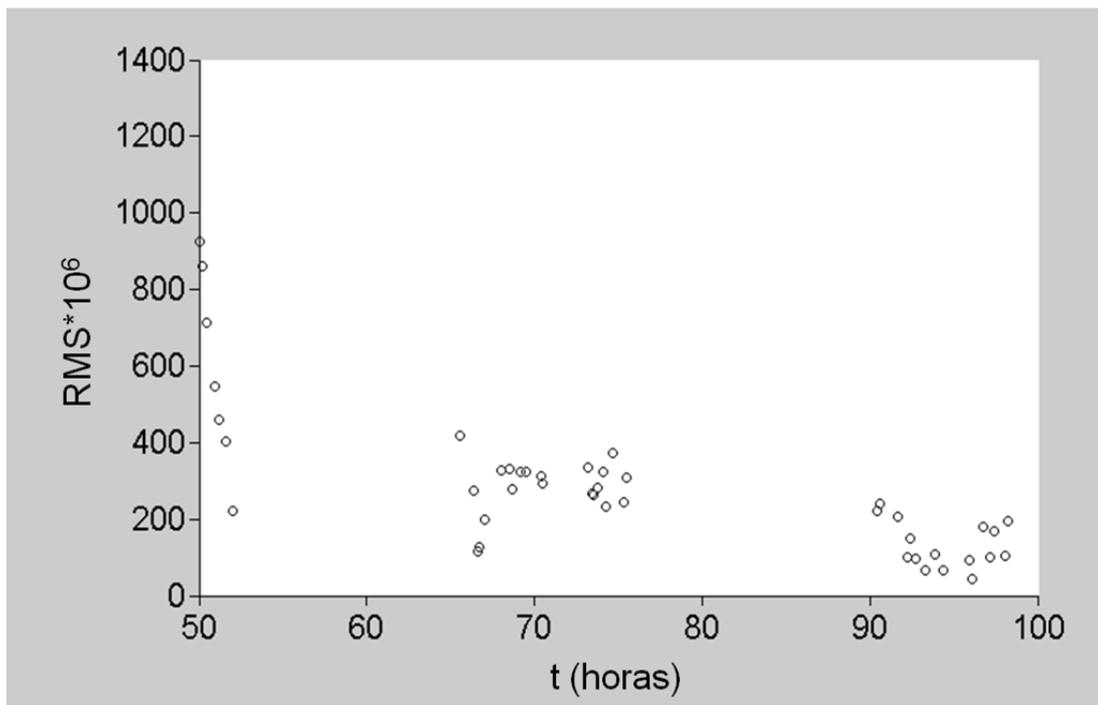


Figura 11: valores de RMS durante el segundo periodo de 48 horas

Puede resaltarse de la figura anterior, cuando se compara con la figura 9, que en ambas existe una tendencia claramente decreciente en las horas iniciales, pero luego los valores de RMS tienden a oscilar de forma aleatoria en torno a un valor medio. El anterior hecho sugiere que un periodo de calentamiento (o estabilización) de 30 minutos no es suficiente para alcanzar un funcionamiento óptimo del equipo, y que una interrupción corta (como la que ocurrió a las 45 horas

de ensayo) es suficiente para interferir en la estabilidad del instrumento (probablemente por cambios ligeros de temperatura que pueden producirse en la fuente de luz si ésta es apagada).

3.2) Segunda serie de ensayos

En esta serie de ensayos se calibró el instrumento cada hora y la capsula de pienso fue medida cada 20 minutos (aproximadamente), tal y como se indicara en el apartado 2.2. Si todos los espectros de esta serie fuesen representados en una sola figura, se llegaría a una imagen similar a la de la figura 7 (por lo que para ver la variabilidad entre espectros hace falta de nuevo recurrir a las diferencias espectrales y a los valores de RMS). Por este motivo, en la figura 12 se presentan las diferencias entre absorbancias, más significativas, registradas en estos ensayos (respecto del espectro medio tomado como línea base). Como en los casos anteriores, se observan diferencias erráticas que en el entorno de los 1400nm tienden a seguir patrones en “V” (posiblemente por cambios de humedad), y las diferencias máximas encontradas son normalmente inferiores a $1,5 \cdot 10^{-3}$ (valor semejante a los antes referidos).

En lo que respecta al parámetro RMS, en la figura 13 se presenta su evolución respecto del tiempo. Los puntos que están marcados con dos círculos concéntricos indican aquellas lecturas en las que justo antes fueron pasadas las referencias blanca y negra. El valor medio de $\text{RMS} \cdot 10^6$ en esta ocasión fue cercano a 438. Si se compara este resultado con los correspondientes a los ensayos previos (645 y 278, respectivamente, ver figuras 9 y 11) salta a la vista que no se ha logrado una gran mejora tras pasar cada hora las referencias blanca y negra. No obstante, sí parece observarse al principio de esta serie que los valores de $\text{RMS} \cdot 10^6$ son algo menores a los iniciales de las figuras 9 y 11 (para $t \approx 0$ horas y $t \approx 50$ horas, respectivamente).

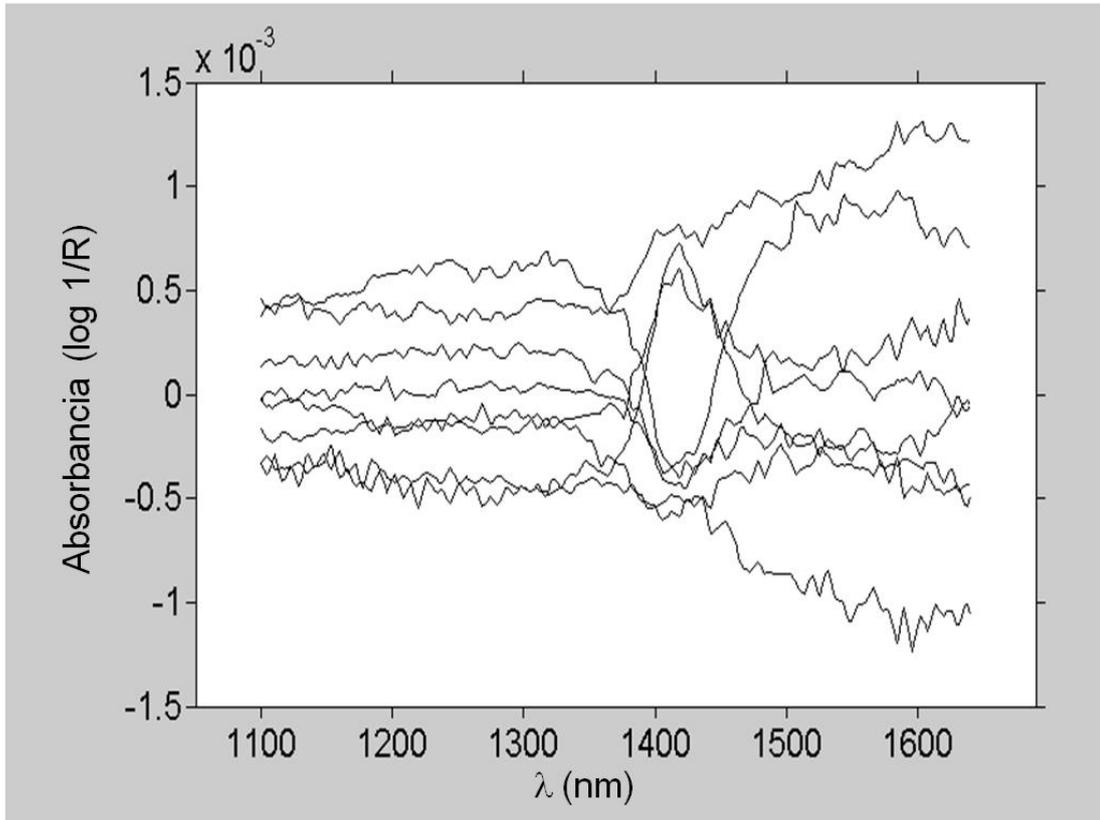


Figura 12: diferencias espectrales durante la segunda serie de ensayos

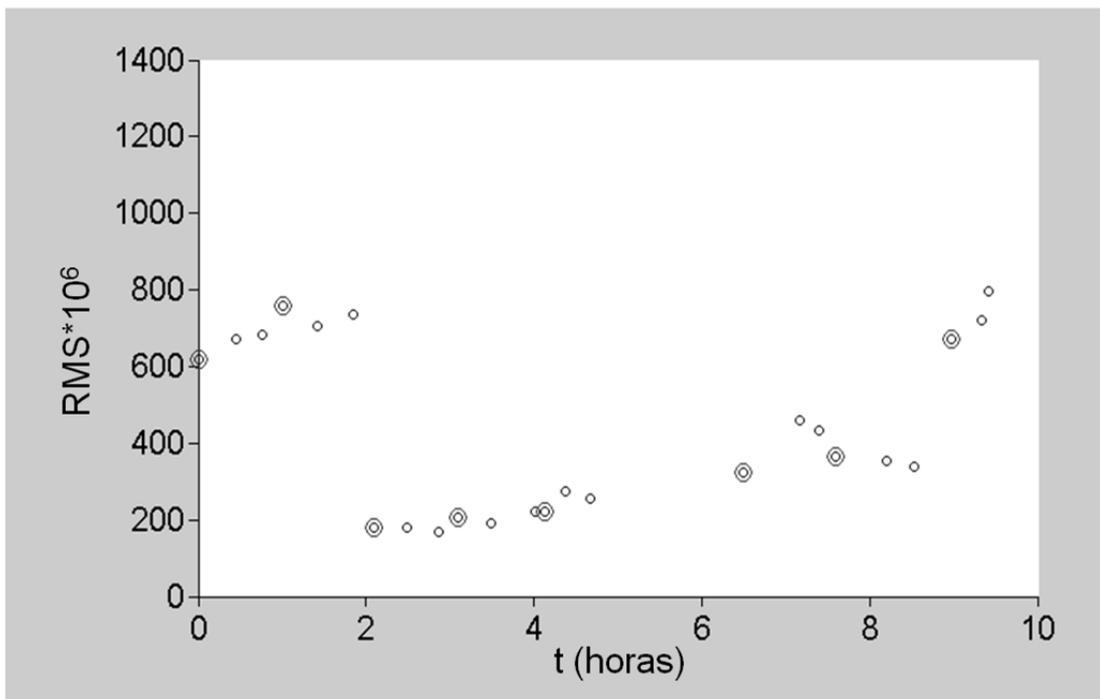


Figura 13: valores de RMS para la segunda serie de ensayos

En general, como recomendación de uso suele aceptarse que cualquier espectrómetro que incluya una fuente de luz debe ser encendido algún tiempo antes de tomar cualquier medida (para evitar errores no deseados). Algunos autores proponen que este periodo de calentamiento sea de 2 horas (Alamar et al., 2007; Greensill y Walsh, 2002). Nicolaï et al. (2007) proponen que el equipo sea encendido el día de antes. Sin embargo, en estos trabajos no se aporta justificación alguna que venga a aclarar cuál recomendación es más idónea. A la vista de los resultados presentados en las figuras 9, 11 y 13, parece razonable afirmar que un periodo de calentamiento de 30 minutos es un intervalo de tiempo muy corto, y que 24 horas pueden ser suficientes para trabajar con el instrumento en condiciones adecuadas.

3.3) Tercera serie de ensayos

En este apartado se presentan algunos resultados preliminares que han comenzado a obtenerse con el software de control cuya funcionamiento se esquematizaba en la figura 5 (ver apartado 2.3) y del que se aporta una explicación más detallada en los anexos 1 ~ 5 de este trabajo.

3.3.1) Información espectral de partida

En las figuras 14, 15 y 16 se muestran, como casos de estudio, los espectros NIR capturados en diferentes pesadas de tres tipos distintos de pienso. La denominación de cada uno de ellos ha sido fijada automáticamente por el sistema (para asegurar su trazabilidad) a través del subprograma "pasos_2_3.m" (consúltese el mismo en el apartado A4.1.1.4 del anexo 4).

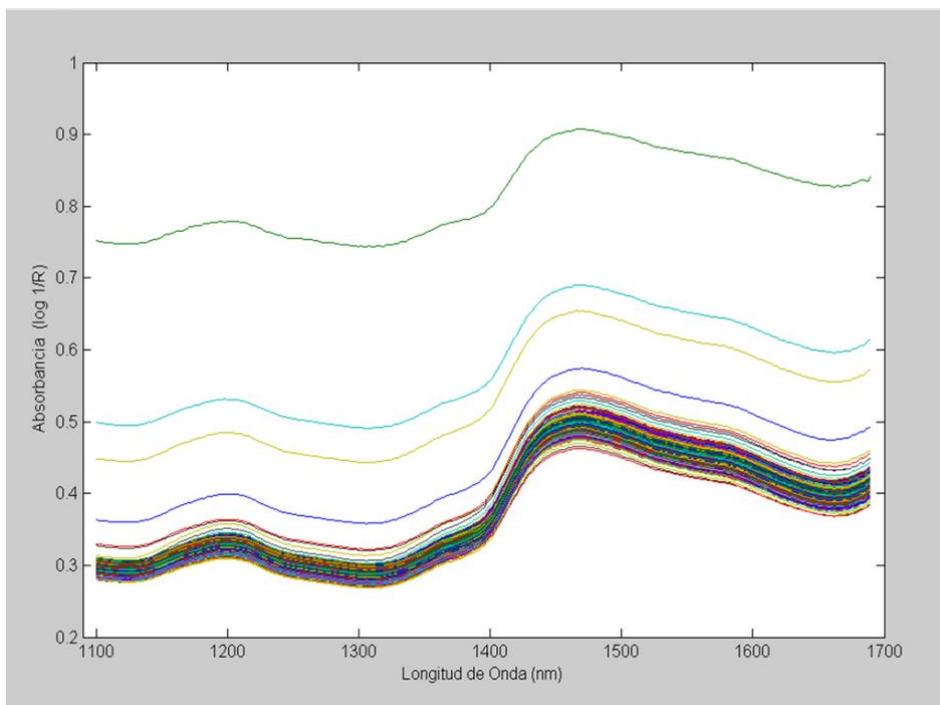


Figura 14: información espectral (sin tratamiento alguno) del pienso 38.761513_65.108_64.283

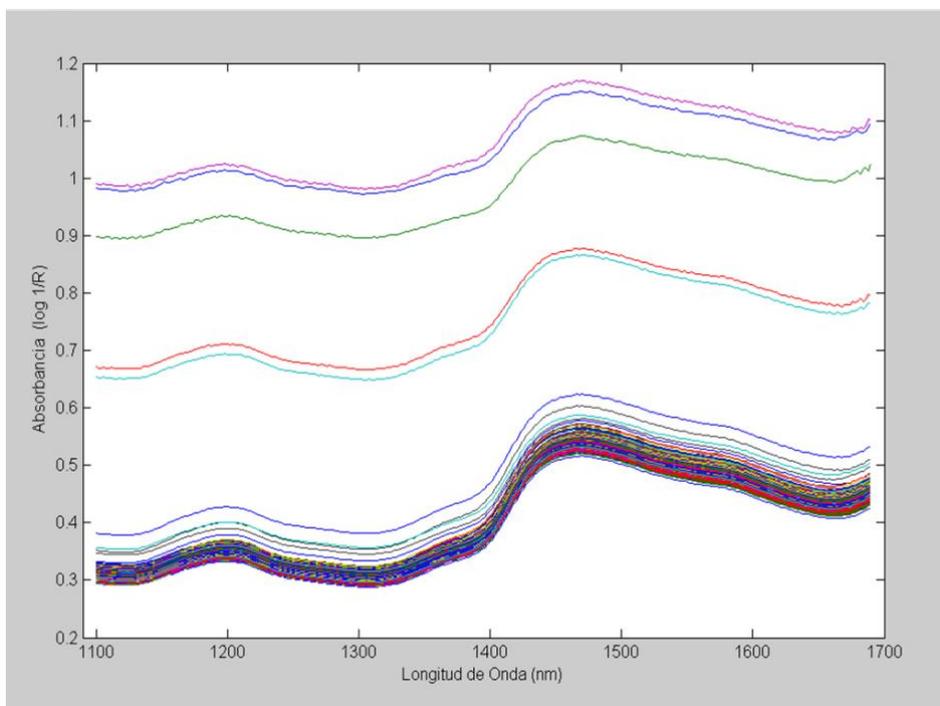


Figura 15: información espectral (sin tratamiento alguno) del pienso 39.915627_72.075_59.061

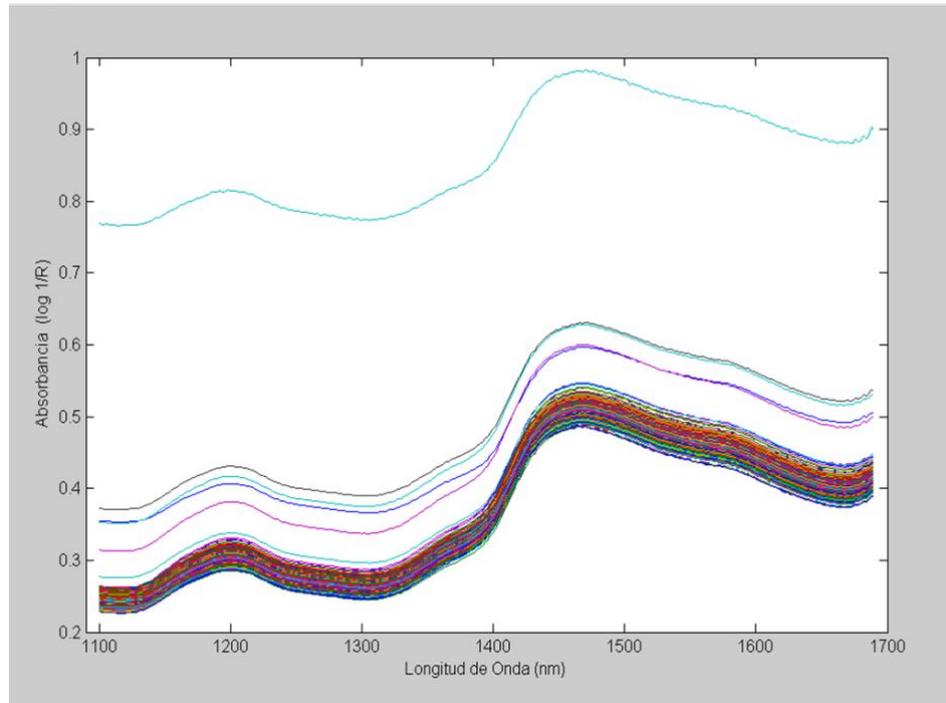


Figura 16: información espectral (sin tratamiento alguno) del pienso 45.436338_70.898_59.312

Puede notarse en las tres figuras precedentes que el aspecto de sus espectros es similar al que puede observarse con cualquier producto agroalimentario (Roberts et al., 2004). Es destacable, asimismo, que en cada una de ellas existe un conjunto de espectros claramente agrupado que se encuentra separado de otros espectros (menos numerosos) que podrían ser considerados como “outliers” (anómalos).

La explicación del comportamiento anómalo de los espectros antes presentados puede ser justificada con la ayuda de la figura 17. En ella se muestra, como ejemplo, la absorbancia de los espectros de la figura 14 para la longitud de onda⁵ $\lambda_i = 1100$ nm. Puede verse la repetición de un patrón casi idéntico (cada 90 valores) que se corresponde con las 90 medidas espectrales que normalmente se

⁵ Nótese que para elaborar dicha figura 17 se podrían haber tomado como referencia otro valor de λ_i , pero para los propósitos de este análisis el aspecto de tal figura seguiría siendo muy parecido al ahora mostrado.

toman en cada pesada (nótese que la segunda pesada de este lote sólo tuvo unas 40 medidas por ser más pequeña por razones de fabricación). En algunos casos, sin embargo, se puede apreciar un valor anormalmente alto de absorbancia.

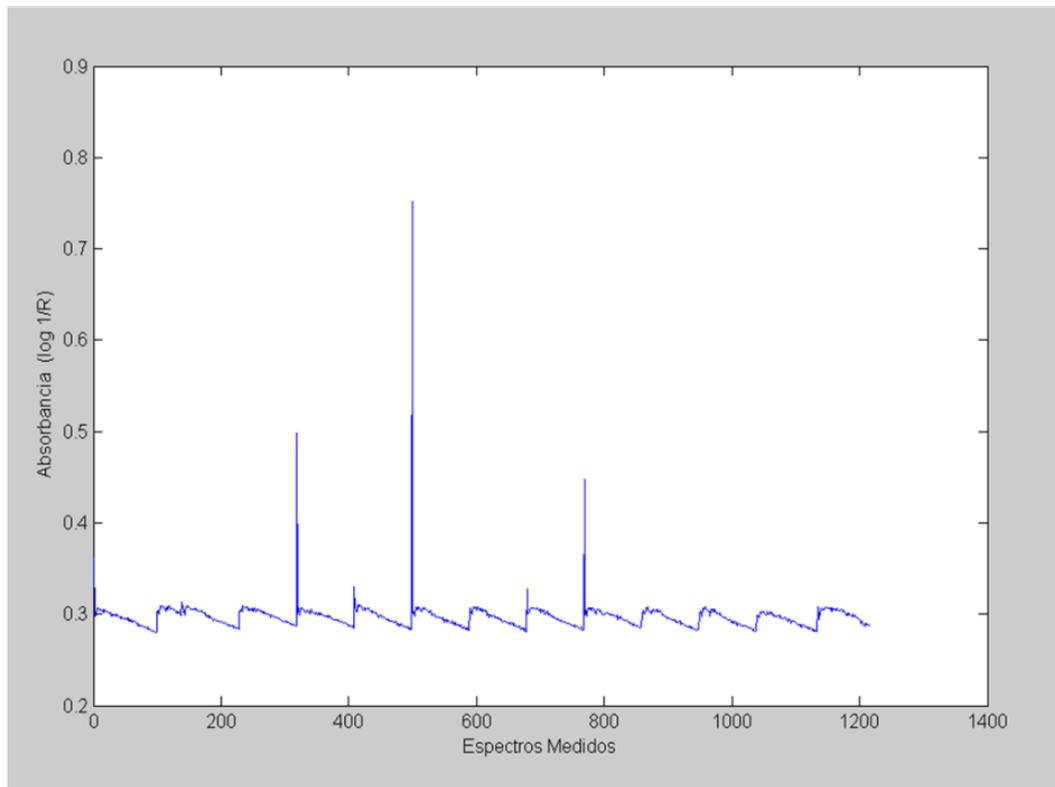


Figura 17: valores de absorbancia del pienso 38.761513_65.108_64.283 (sin tratamiento alguno) para $\lambda_i = 1100$ nm

Tras hacer las verificaciones oportunas, se ha comprobado que los valores anormales de absorbancia reflejados en la figura 17 pertenecen a los espectros anómalos que se mostraban en la figura 14, y que dichos valores anómalos son de espectros medidos justo al inicio de cada pesada. A la vista de estos resultados, parece razonable suponer que el espectrofotómetro empleado necesita, en algunos casos, de un “periodo de adaptación” para medir correctamente los espectros “on-line” al comienzo de ciertas pesadas.

Considerando la forma de medir del instrumento (en continuo aun cuando no haya pienso que medir), y el proceso de fabricación de la planta, es probable que

el citado “periodo de adaptación” esté originado por una falta parcial de pienso en el punto de medida (situación normal que puede producirse al inicio de cualquier pesada) y por el periodo de integración del propio instrumento (cada espectro es el resultado de una media de múltiples medidas, que son realizadas en 1 segundo, y puede ocurrir que algunas de ellas hayan sido hechas sobre vacío, cuando el pienso aún no ha alcanzado el punto de control).

Aunque la situación descrita puede parecer un problema, debe indicarse que la aparición de la misma ha supuesto una ventaja más que un inconveniente: por una parte, se ha dispuesto de un método sencillo para identificar inicialmente la separación entre espectros de diferentes pesadas (lo que ha sido usado en este Trabajo para facilitar el análisis de los primeros resultados), y por otra, la solución de este “defecto” es simple, pues basta con una sencilla mejora en el algoritmo de captura de espectros⁶ (ver subprograma “paso_4.m” en el apartado A4.1.1.5 del anexo 4) para que el problema desaparezca (se pueden despreciar en cada pesada los 2-3 primeros espectros medidos y el “defecto” detectado estaría resuelto).

3.3.2) Primeros análisis PCA

Como se deduce del contenido del anexo 1 (ver apartado A1.2.1.1), el software creado requiere de un periodo de entrenamiento en el que el mismo sólo se ocupa de almacenar información para poder elaborar (de forma automática) modelos de predicción que permitan llevar a cabo las tareas de control para las que está diseñado. Teniendo en cuenta que los datos recogidos por el momento aún no son suficientes para considerar que ese periodo de entrenamiento está

⁶ En este algoritmo se establece, como criterio de diseño, que un espectro es válido si su absorbancia es menor de 1 en el rango de longitudes de onda comprendido entre 1100 - 1120 nm. Esta condición fue establecida teniendo en cuenta, de forma comparada, los valores de absorbancia de los espectros cuando el instrumento empleado está operando en “vacío” (sin muestra en el punto de medida) y cuando está midiendo una muestra cualquiera de pienso.

completado, se ha procedido, no obstante, a llevar a cabo un primer análisis en componentes principales (PCA) de la información espectral recogida, con el fin de estudiar (aunque sólo sea de forma muy preliminar) el comportamiento de los espectros medidos a lo largo de diferentes pesadas. Es por ello que en las figuras 18, 19 y 20 se muestran, como ejemplo, los “scores” (coordenadas) de la primera componente principal de los modelos PCA ajustados con los espectros (sin tratar) de los tres tipos de piensos que se han referido en el apartado previo.

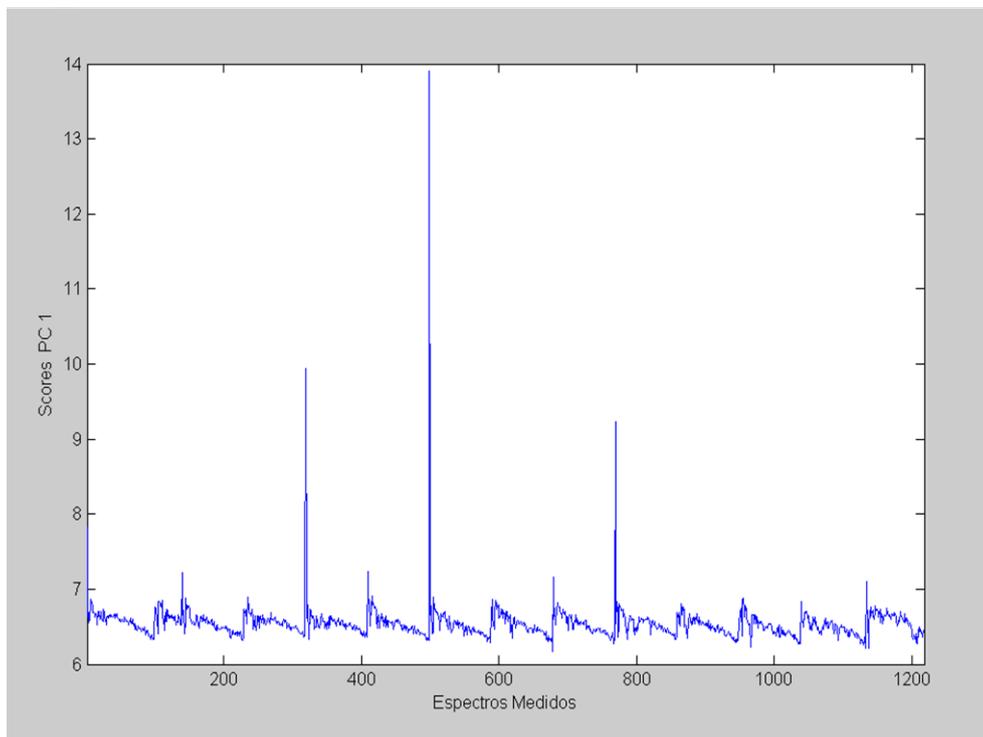


Figura 18: “scores” de la primera componente principal (sin tratamiento alguno) en función de los espectros medidos con el pienso 38.761513_65.108_64.283

Como en el caso de la figura 17, es destacable en las figuras 18, 19 y 20 el patrón repetitivo y descendente que se observa (cuyo origen merece ser objeto de estudio en trabajos futuros) que se corresponde con las 90 medidas espectrales que normalmente se toman en cada pesada. En algunos casos, como se mencionase antes, aparece algún “pico” anómalo que marca el inicio de algunas de las pesadas y que está relacionado con el “periodo de adaptación” del espectrofotómetro.

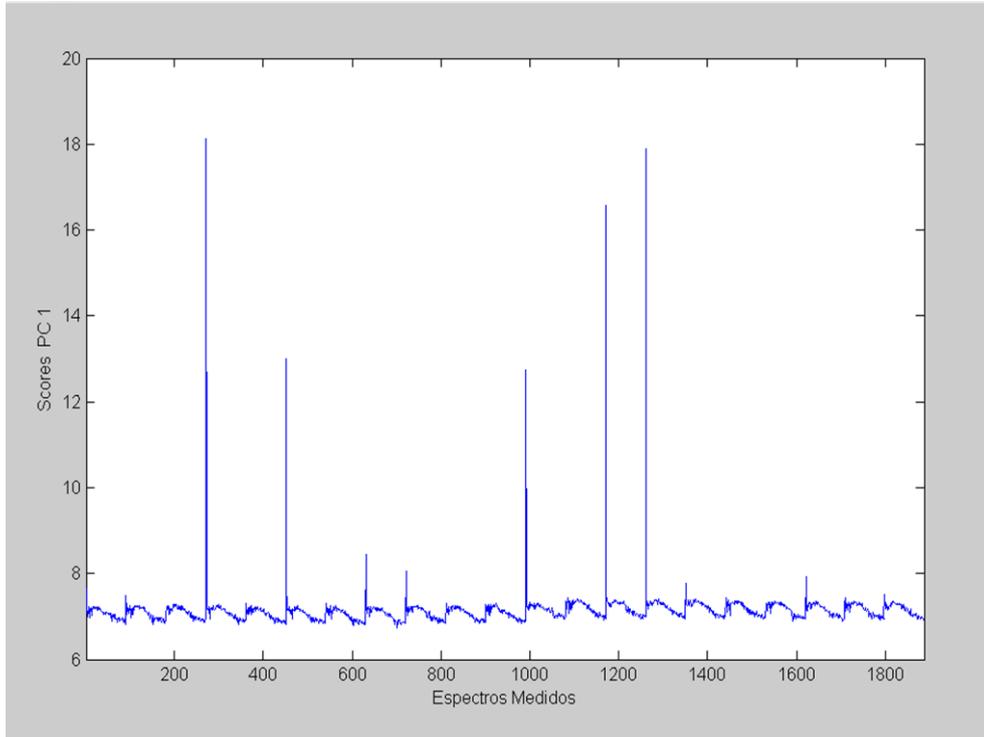


Figura 19: “scores” de la primera componente principal (sin tratamiento alguno) en función de los espectros medidos con el pienso 39.915627_72.075_59.061

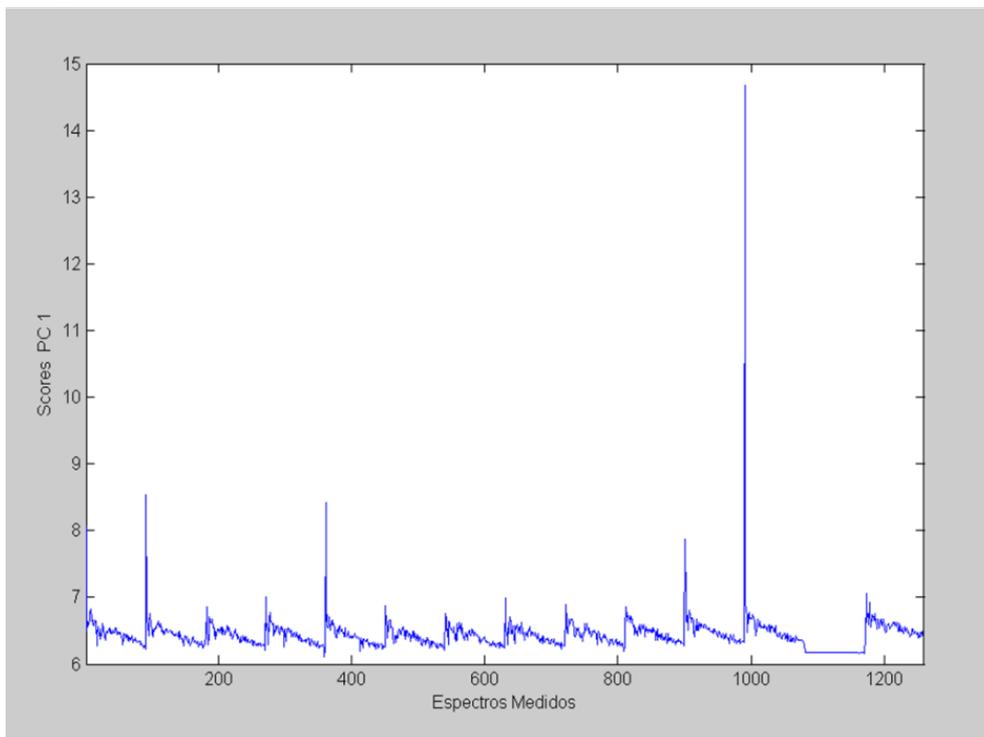


Figura 20: “scores” de la primera componente principal (sin tratamiento alguno) en función de los espectros medidos con el pienso 45.436338_70.898_59.312

Al margen de lo anterior, es digno de comentario la tendencia “plana” que aparece en los “scores” de la figura 20 para los espectros medidos casi al final de ese grupo de observaciones. Tras estudiar los datos originales, se ha podido comprobar (ver figura 21) que los espectros de la pesada 13, en la que aparece la tendencia plana, se concentran sobre una misma línea base (representada en color negro en dicha figura 21). Este comportamiento difiere significativamente de una pesada normal (como la número 12 producida justo antes) en la que los espectros tienden a separarse unos de otros por la variabilidad de las muestras medidas (en cuanto a composición original, granulometría, humedad, etc.) y por los cambios en el entorno de observación (temperatura, humedad, movimiento y vibraciones, etc.).

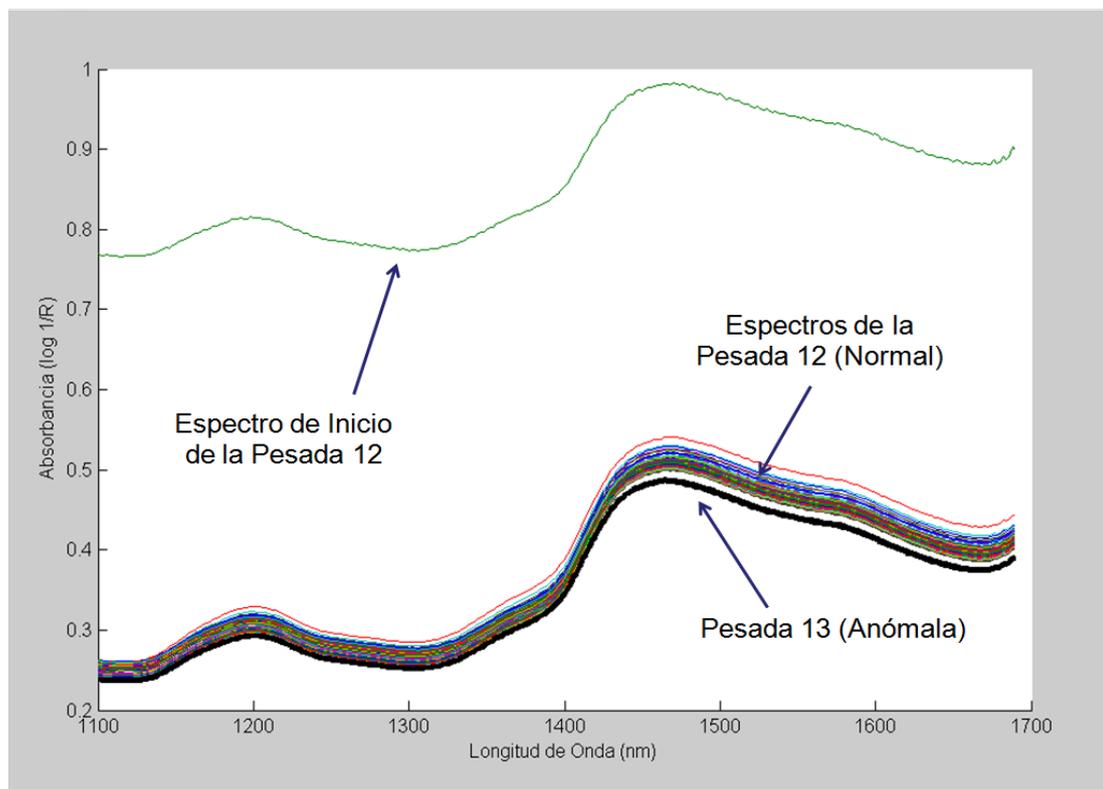


Figura 21: espectros de una “pesada corriente” y de otra en la que ha ocurrido alguna anomalía pertenecientes al pienso 45.436338_70.898_59.312

Como se ha podido verificar en los apartados 3.1 y 3.2, cuando un espectrofotómetro como el empleado en este Trabajo opera repetidamente sobre

un punto fijo de una misma muestra, los espectros de dicha muestra se concentran sobre una misma línea base dando la apariencia de ser un “espectro único”. Teniendo presente este hecho, es posible que la apariencia de los espectros de la pesada 13 sea debida a que el espectrofotómetro tomó sus medidas espectrales en esa pesada (durante el tiempo de captura programado) sobre una masa fija, lo que viene a indicar que en la fabricación de esa pesada pudo haber algún problema que provocase la parada del pienso en el canal de distribución en el que está instalado el equipo NIR. En el futuro, cuando el sistema de control esté completamente operativo, es esperable que este tipo de anomalías sean detectadas por el mismo en tiempo real y que desde la sala de control pueda tomarse una decisión al respecto.

3.3.3) Comportamiento de otras componentes principales

De forma similar a lo hecho antes, en las figuras 22 ~ 25 se presentan los “scores” de la segunda y tercera componente principal de los modelos PCA que se vienen analizando en este apartado (los espectros de partida no fueron tratados). El estudio de más componentes principales, y de los tratamientos estadísticos que pueden ayudar a conocer el significado de las mismas en relación con la calidad de los piensos analizados, se pospone para trabajos futuros cuando se disponga de un mayor volumen de información.

De forma muy similar a las figuras 18, 19 y 20 (“scores” de la primera componente principal) es comentable de las figuras 22, 24 y 26 (“scores” de la segunda componente principal) el patrón repetitivo - descendente asociado a las medidas espectrales de cada pesada, los “scores pico” que marcan el inicio de algunas de ellas y la anomalía espectral de la pesada 13 del pienso 45.436338_70.898_59.312.

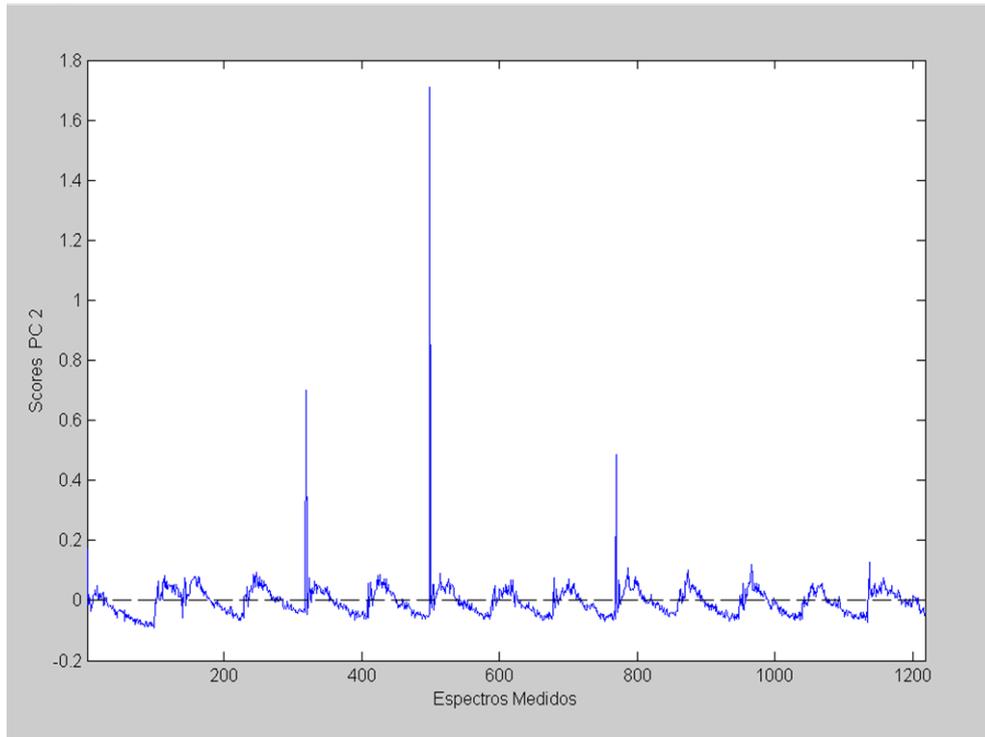


Figura 22: “scores” de la segunda componente principal (sin tratamiento alguno) en función de los espectros medidos con el pienso 38.761513_65.108_64.283

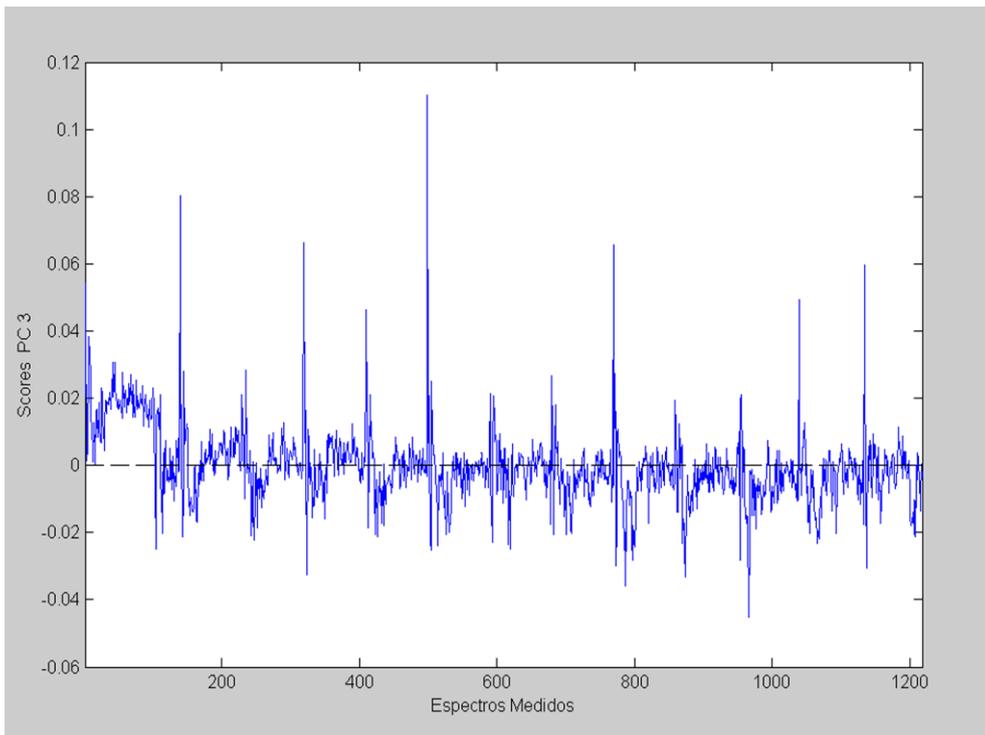


Figura 23: “scores” de la tercera componente principal (sin tratamiento alguno) en función de los espectros medidos con el pienso 38.761513_65.108_64.283

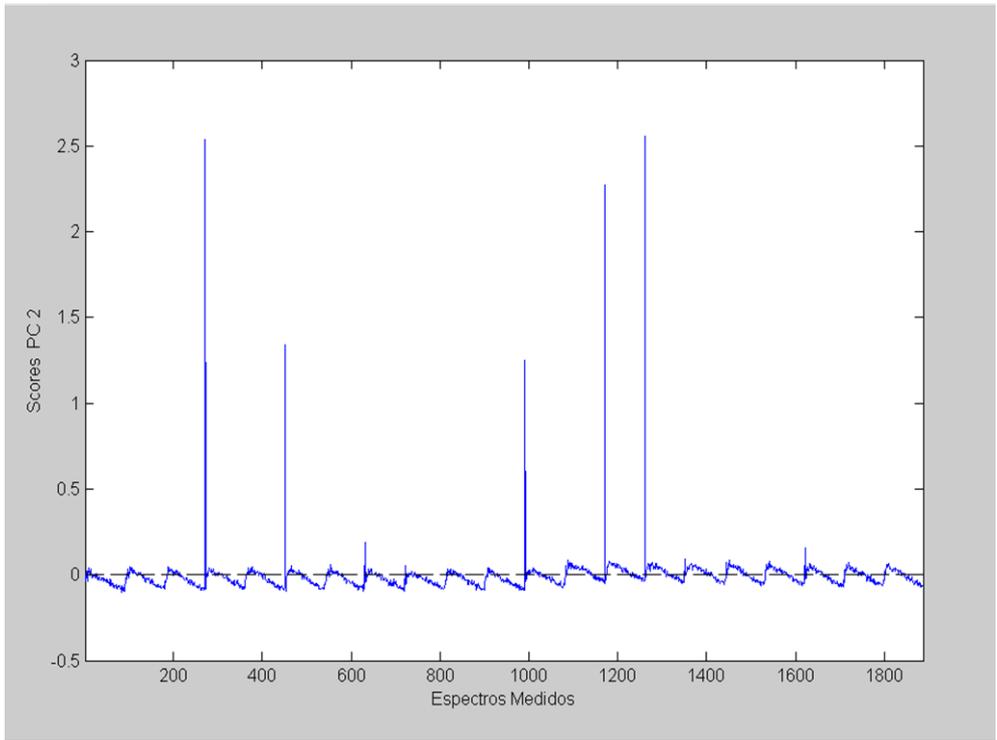


Figura 24: “scores” de la segunda componente principal (sin tratamiento alguno) en función de los espectros medidos con el pienso 39.915627_72.075_59.061

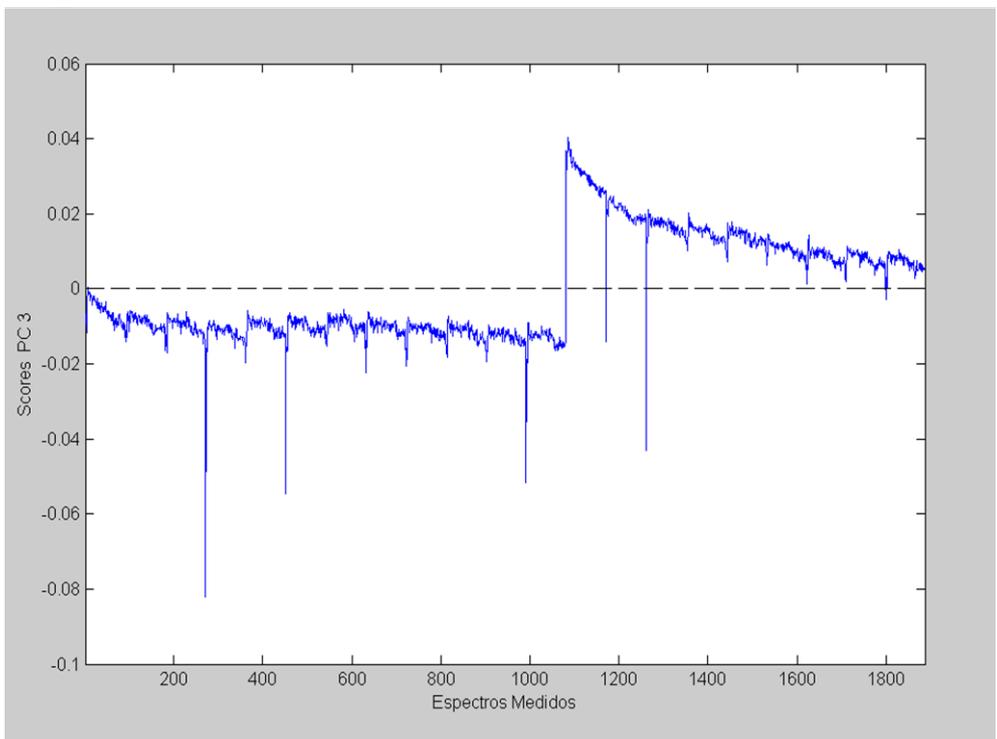


Figura 25: “scores” de la tercera componente principal (sin tratamiento alguno) en función de los espectros medidos con el pienso 39.915627_72.075_59.061

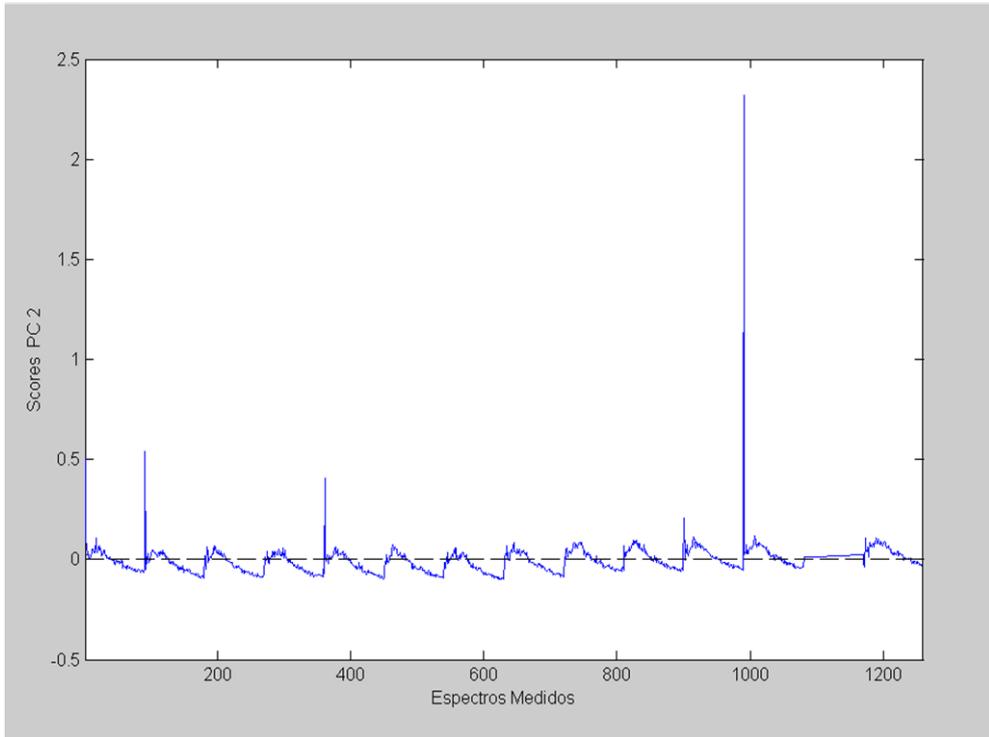


Figura 26: “scores” de la segunda componente principal (sin tratamiento alguno) en función de los espectros medidos con el pienso 45.436338_70.898_59.312

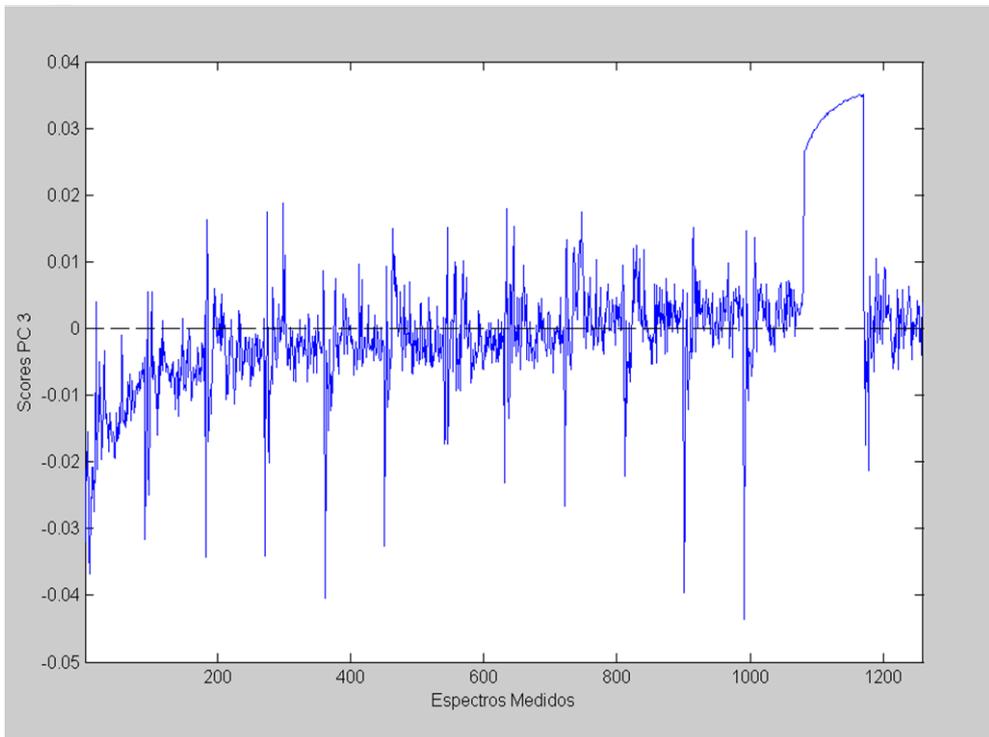


Figura 27: “scores” de la tercera componente principal (sin tratamiento alguno) en función de los espectros medidos con el pienso 45.436338_70.898_59.312

Sin embargo, en las figuras 23, 25 y 27 (“scores” de la tercera componente principal) los patrones repetitivos antes indicados (en figuras 22, 24 y 26) ya no se ven tan claros y es destacable que al inicio de cada bloque (lote) de pesadas se observa un efecto llamativo: las pesadas iniciales parecen mostrar una tendencia diferente a las del resto del lote. Más aún, en la figura 25 se observan dos bloques de pesadas claramente diferenciados desde el espectro 1080, aproximadamente.

Tras analizar con cuidado los datos originales que permitieron elaborar la citada figura 25, es resaltable que los bloques de pesadas representados se corresponden con sendos lotes de pienso que fueron fabricados en días diferentes (único caso de los piensos estudiados con tal volumen de información). Además, el segundo lote de pesadas fue fabricado tras 7 horas sin producir pienso alguno⁷. Teniendo presente estos resultados, parece razonable asumir que algo ocurre en el proceso de fabricación, y/o en el proceso de control, de las pesadas iniciales de cada lote (que las hace diferentes de todas las demás) como si tales procesos requirieran de un periodo de transición para alcanzar un régimen estable de funcionamiento.

4) Conclusiones

Como resumen de todo lo expuesto, se considera importante remarcar de los ensayos realizados que:

- Bajo ambiente estable (de temperatura y humedad) no se consigue una mejora apreciable en la precisión de las medidas realizadas, con el espectrofotómetro empleado, si las referencias blanca y negra son pasadas cada hora en lugar de hacerlo a intervalos mayores (del orden de días). Sin

⁷ Como se indicara en el apartado 2.3, dependiendo de la demanda, no es raro que entre la fabricación de lotes de piensos diferentes puedan transcurrir periodos de 0,5 – 1 hora, e incluso más.

embargo, la estabilidad y funcionamiento de dicho equipo sí parece mejorar si es usado de forma ininterrumpida (al menos durante periodos semanales) y las medidas comienzan a realizarse tras una fase de calentamiento de 24 ~ 48 horas.

- A partir de los resultados obtenidos en las dos primeras series de ensayos parece razonable considerar que, bajo ambiente estable, el instrumento probado puede ser adecuado para llevar a cabo el control NIR “on line” de materias primas (o productos) sin necesidad de tener que pasar frecuentemente las referencias o de tener que implementar (de forma adicional) un mecanismo automático diseñado para tal fin (lo que facilita y economiza su aplicación en este tipo de controles).
- Se ha programado un software experto capaz de gestionar y registrar de forma automática el control de calidad “on line” de los piensos fabricados por COVAP (manteniendo la trazabilidad del producto en dicho proceso de control). Gracias a este programa ha sido posible la realización de una tercera serie de ensayos (usando la tecnología NIR sobre la propia línea de producción) en la que puede destacarse que se han observado una serie de patrones espectrales, dentro de cada pesada y al inicio de cada lote, que merecen un estudio más profundo (pues cabe la posibilidad de que exista alguna relación entre ellos que se esté manifestando a diferente escala temporal).
- Relacionado con el aspecto anterior, merece indicarse que tras los primeros resultados obtenidos en los ensayos “on line” se abre una línea de trabajo que debería estar orientada a dilucidar los factores o agentes que han podido producir las diferencias espectrales observadas. Si tales factores están ligados al proceso de fabricación, el control de éstos podría redundar en una mejora de la calidad de los piensos actualmente producidos por la

empresa que ha colaborado en este estudio. Si es el proceso de control (instrumento/instalación) el causante de tales diferencias, la eliminación de éstas podría servir para mejorar la operatividad/precisión del sistema diseñado. En cualquier caso, dicha materia de estudio se entiende que debe ser objeto de investigación en trabajos futuros.

Anexo 1: Arquitectura y funcionamiento del sistema

En este anexo se describirá la estructura y funcionamiento del software que se ha empleado para la captura de espectros asociados a la tercera serie de ensayos (ver apartados 2.3 y 3.3) y que además es útil para gestionar en tiempo real el control de calidad de los piensos fabricados por la empresa que ha colaborado en este Trabajo de Investigación.

A1.1) Arquitectura

El sistema de control creado consta de 2 bloques que han sido programados⁸ usando como lenguaje MATLAB 7.0 (R14). El primero de estos bloques está controlado por el programa principal “NIVEL_0L1.m” (ver figura A1.1) que se encarga básicamente de las tareas de cálculo y gestión requeridas por el sistema. Puede verse que este primer bloque sigue una estructura en forma de “árbol” que va ramificándose a medida que las tareas son cada vez más sencillas.

En conjunto, y para cada control de calidad realizado, los subprogramas ligados a “NIVEL_0L1.m” se encargan de la captura de la fórmula de referencia, de la captura de espectros, de la gestión de dicha información y de la generación de resultados (consúltese el anexo 4 y véase la figura 5 en el apartado 2.3).

⁸ En las figuras de este apartado el símbolo () se ha empleado como “extensión” para nombrar determinadas funciones de importancia que están integradas dentro de un subprograma dado. La extensión .m hace referencia a un subprograma con formato MATLAB, y la extensión .dll recordemos que está asociada a una librería dinámica (de Windows).

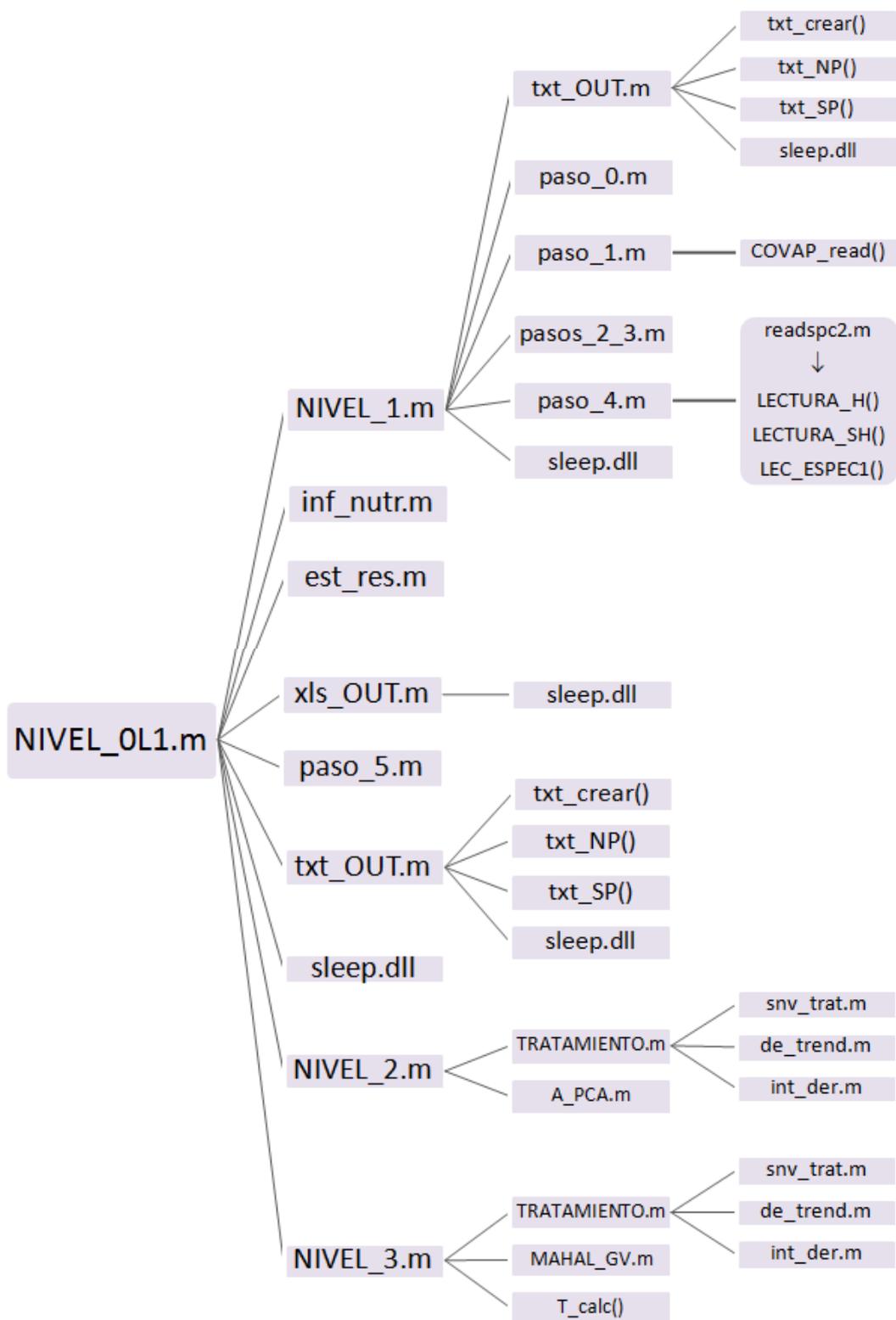


Figura A1.1: bloque de subprogramas controlado por “NIVEL_0L1.m”

El segundo bloque de subprogramas está controlado por el programa “control_menu.m” (ver figura A1.2), y su función fundamental es la de presentar, al usuario que controle o supervise el PC del sistema, una interfaz amigable con los resultados más importantes que sirvan para tomar decisiones en tiempo real.

Merece notarse que en los anexos 2 y 3 se presentan y describen con profundidad los ficheros de almacenamiento gestionados respectivamente por NIVEL_OL1.m y por control_menu.m. Estos ficheros tienen suma importancia pues en ellos se guardan de forma dinámica los parámetros, variables, datos, resultados e incluso gráficos que en todo momento requiere el sistema para poder llevar a cabo un funcionamiento correcto. En los anexos 4 y 5 se muestra, para los dos bloques de programación citados, el código fuente de todos los subprogramas desarrollados, aportando asimismo numerosos comentarios que facilitan su comprensión.

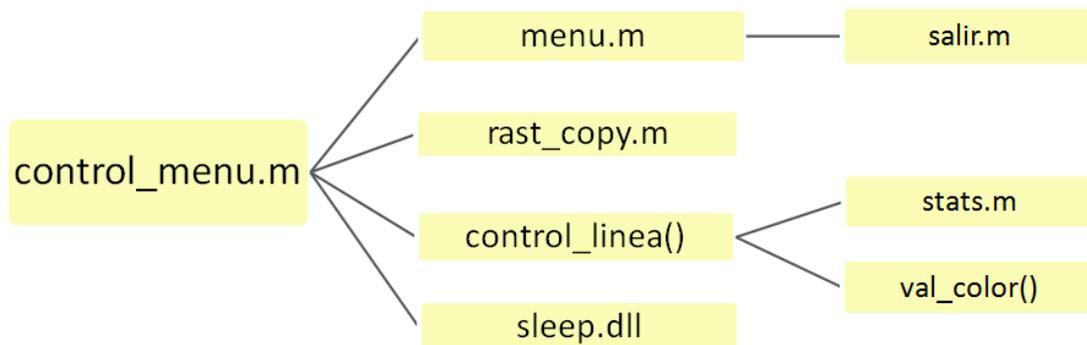


Figura A1.2: bloque de subprogramas controlado por “control_menu.m”

En cuanto a la “distribución física” de todos los ficheros citados hasta ahora, cabe señalar que en las figuras A1.3 y A1.4 se presentan los árboles de directorios que sirven para alojar todos los archivos ligados a los dos bloques de programación del sistema.

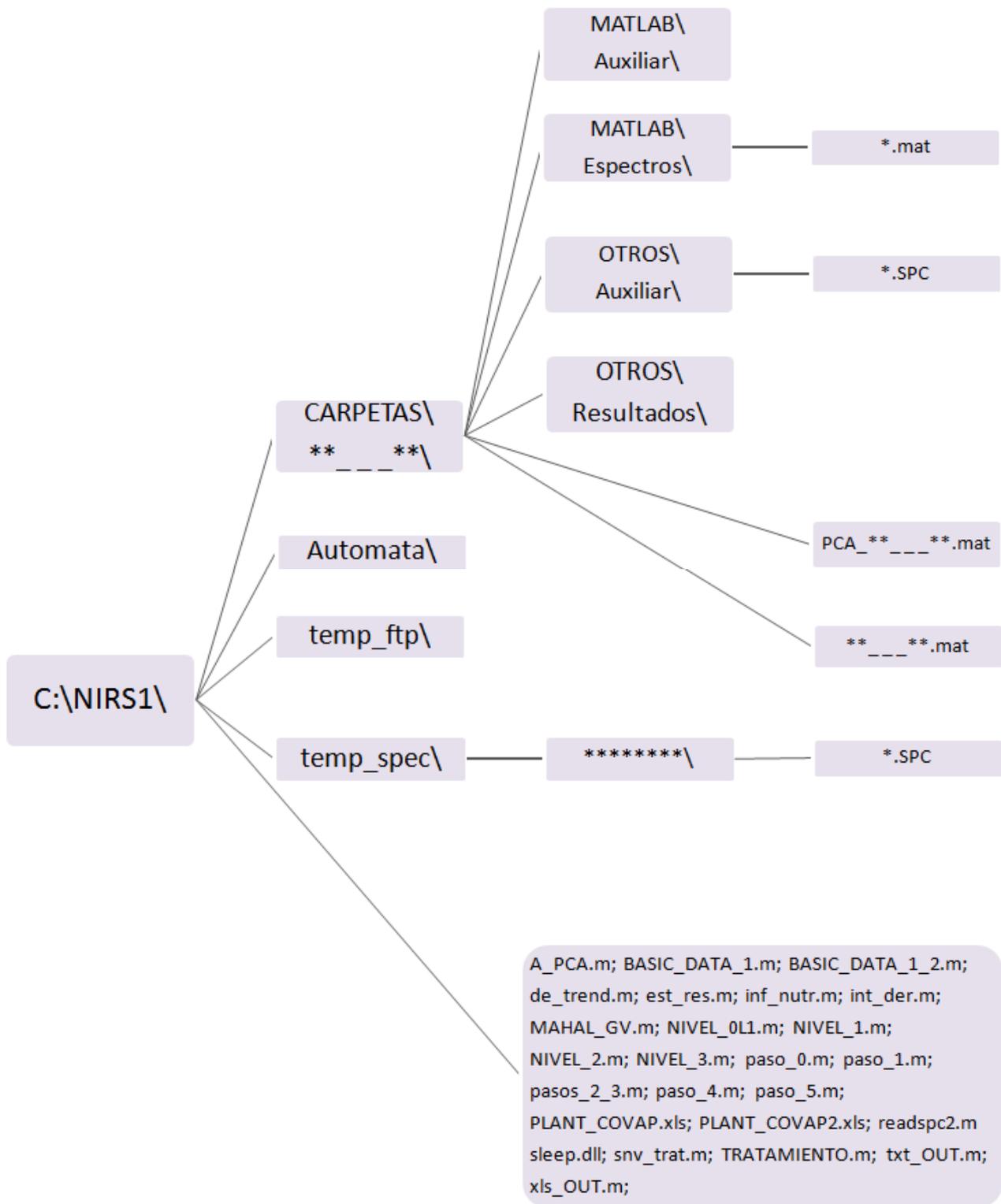


Figura A1.3: árbol de directorios y ficheros del bloque ligado a NIVEL_0L1.m

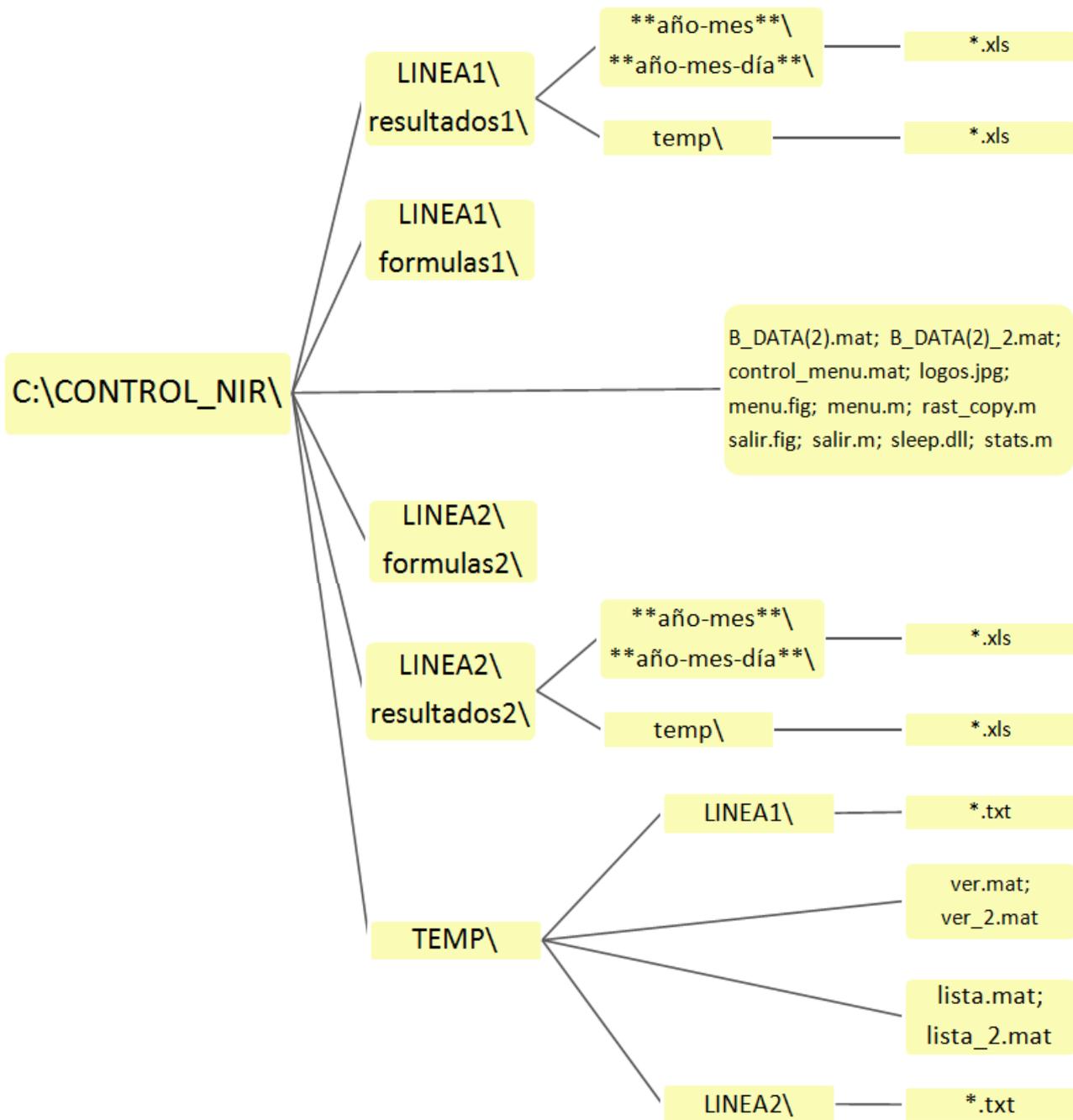


Figura A1.4: árbol de directorios y ficheros del bloque ligado a control_menu.m

A1.2) Funcionamiento del sistema de control

Una vez que la estructura del sistema ha sido descrita, es momento de pasar a explicar su funcionamiento. Tras el arranque del software, el aspecto que muestra el PC que lo gestiona es como se muestra en la figura A1.5, en la que se ven desplegados tanto el programa CORA de Carl Zeiss (2004) (programa suministrado por el fabricante, véase también el anexo 6) así como la interface propiamente dicha de la aplicación creada (cuya denominación simplificada ha quedado establecida como QCP⁹).

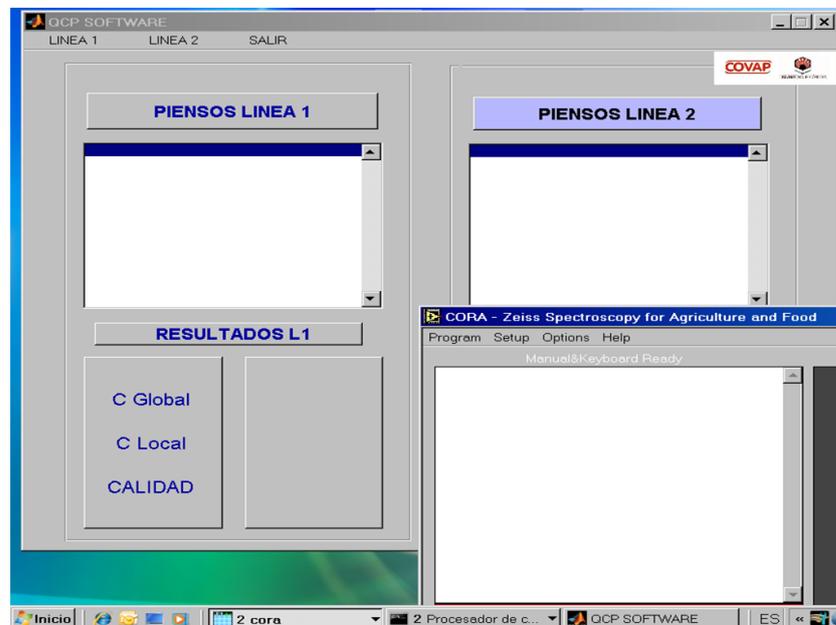


Figura A1.5: Aspecto del PC del sistema tras el arranque de software QCP

La interfaz del programa QCP (figura A1.6) consta básicamente de tres partes. La primera de ellas (en el lado superior) se refiere a un menú básico que puede ser usado para activar o desactivar el control NIR sobre una línea de producción dada y para cerrar el sistema si así se desea (botón “SALIR”).

⁹ Acrónimo que resume el concepto o idea de “Quality Control Project”.

Inicialmente, el programa está creado para poder controlar 2 líneas (a través de los submenús “LINEA 1” y “LINEA 2”). Como ejemplo, en la figura A1.6 se muestra desplegado el submenú LINEA 2 y muestra las opciones disponibles que pueden ser elegidas (“ACTIVAR L2” si se desea activar dicha línea y “DESACTIVAR L2” si se desea lo contrario).

La segunda parte de la interfaz consiste en una “lista de chequeo” en donde se muestran todas las pesadas de los diferentes lotes de pienso que se van fabricando. La denominación de cada pesada sigue una secuencia lógica de números y letras (similar a la de los ficheros *.xls que serán descritos en el apartado A2.3 del anexo 2) que la hace única y sirve para distinguirla claramente de todas las demás (para posibilitar así su trazabilidad).

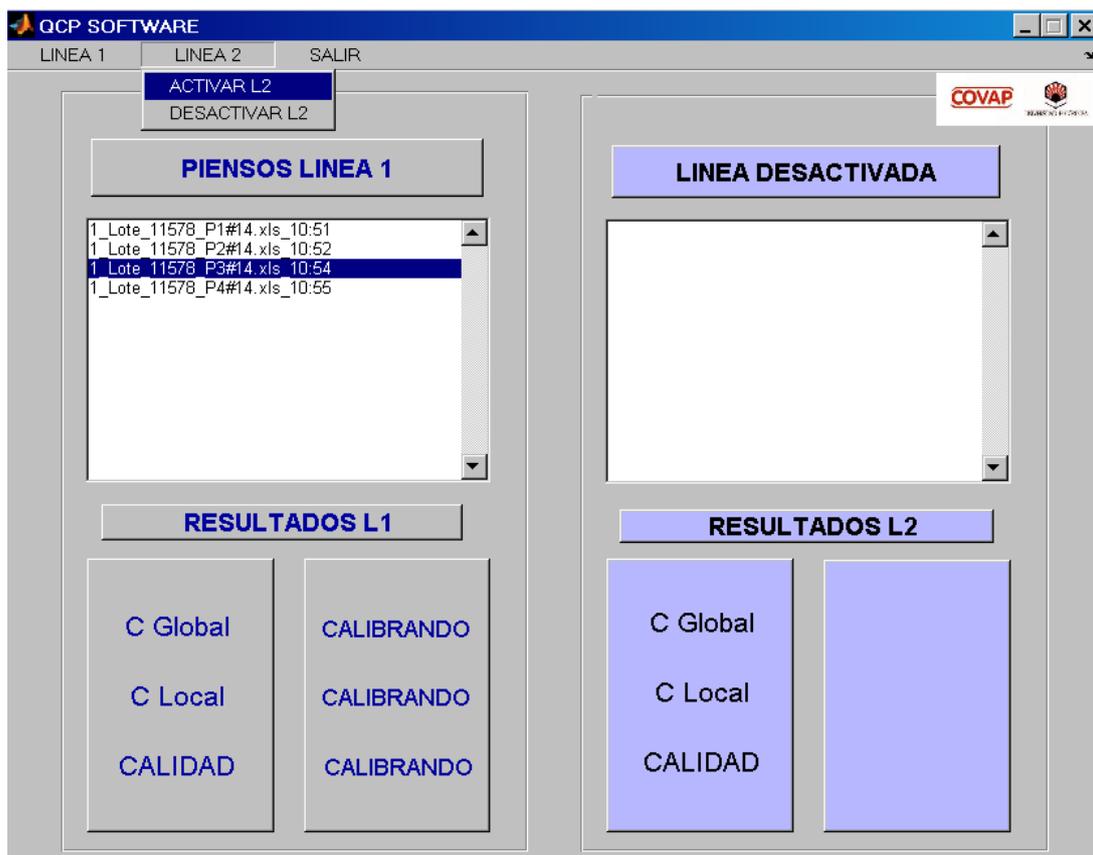


Figura A1.6: menú de control del programa QCP

Como ejemplo, si una pesada de la citada lista de chequeo tiene por nombre: “1_Lote_11578_P3#14.xls_10:54” (ver figura A1.6), el primer número (1) indicará la línea en donde fue fabricada la pesada, el segundo número (11578) hará referencia al lote de fabricación, el tercero (3) representará el número de pesada dentro del lote, el cuarto (14) es el número total de pesadas que componen el lote, y los últimos dígitos (10:54) son la hora a la que se realizó el control de la pesada.

Si se hace doble-clic sobre cualquier elemento de la lista de chequeo (ver como ejemplo la figura A1.7 teniendo en cuenta en este caso que se ha marcado la fórmula denominada “1_Lote_11578_P3#14.xls_10:54”), el programa pone a disposición en formato *.xls (de Microsoft Excel) toda la información de los resultados relativos al control de calidad efectuado sobre esa fórmula concreta.

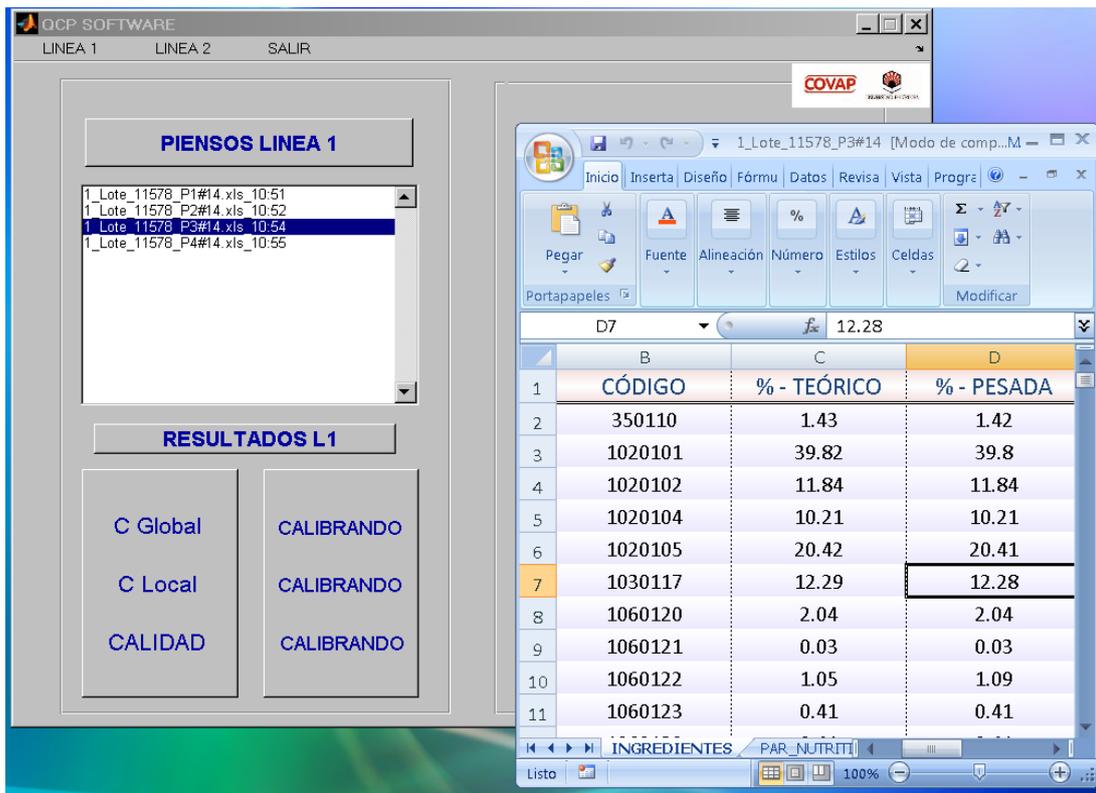


Figura A1.7: despliegue de un fichero *.xls asociado a un elemento de la lista de chequeo

La configuración o presentación del fichero *.xls ligado a cada fórmula queda estructurada tal y como se muestra en la figura A1.8. En ella puede verse que dicho fichero tiene cuatro hojas básicas (“INGREDIENTES”, “PAR_NUTRITIVOS”, “ESTADÍSTICOS” y “LOTE”) de cuyo contenido se ofrece una descripción más detallada en los apartados A2.2 y A2.3 del anexo 2.



Figura A1.8: presentación del contenido de un fichero *.xls asociado a una pesada dada

La tercera parte de la interfaz del programa QCP (ver figura A1.6) se refiere al apartado de resultados mostrado en el lado inferior de la misma, en donde se indican brevemente algunos estadísticos de interés (“C_Global” y “C_Local”, véase más adelante el apartado A1.2.1.2) así como la “CALIDAD” de la pesada fabricada en cada momento. Este último indicador es de vital importancia pues en él se sintetiza, de forma fácilmente interpretable, toda la información estadística ligada a un control dado. La variable CALIDAD puede adoptar uno de los siguientes valores

dependiendo del muestreo realizado en un caso dado: “CALIBRANDO”, “APTO” y “NO APTO” (para más detalle, véase el subprograma “est_res.m” en el apartado A4.1.3 del anexo 4).

A1.2.1) Gestión de la información espectral y de referencia

Cuando el software QCP inicia un ciclo de control (ver figura 5 en apartado 2.3), lo primero que hace es capturar el fichero de formulación (o referencia) de una pesada dada, facilitado en formato “*.txt” por un servidor de COVAP, y usa la información contenida en dicho fichero para crear automáticamente una carpeta específica (si no está creada aún) que será útil para almacenar los datos básicos ligados a esa fórmula. La ruta de acceso a esa carpeta (ver figura A1.3) es: “C:\NIRS1\CARPETAS**_**_**\”, en donde el símbolo “**_**_**” representa de forma general un nombre automático asignado por el sistema usando, en cada caso, la composición particular de ingredientes que tiene cada fórmula de pienso (ver subprograma “pasos_2_3.m” en el apartado A4.1.1.4 del anexo 4).

El contenido de la carpeta “C:\NIRS1\CARPETAS**_**_**\” es diverso (ver figura A1.3), pues en ella se alojan diferentes ficheros de almacenamiento creados por el programa principal NIVEL_0L1.m a la hora de gestionar la información entrante y saliente: “*.xls”, “*.SPC”, “*.mat” de salida por pesada, etc. (véase el anexo 2).

A1.2.1.1) Periodo de entrenamiento o calibración

Una vez que ha sido creada la carpeta específica de una formula dada, el sistema comienza a almacenar en ella la información (de referencia y espectral) que se vaya generando a lo largo del tiempo (ver apartado A2.7 del anexo 2). Sólo los espectros tomados con esa fórmula serán almacenados en esa carpeta. Como opción de configuración, el sistema permite elegir la cantidad mínima de espectros

a partir de los cuales será creado el modelo de componentes principales¹⁰ (PCA) que servirá de base para llevar a cabo las predicciones oportunas (ver apartado A2.1.1 del anexo 2). Es evidente, por tanto, que durante un tiempo de “entrenamiento” el sistema sólo se va a ocupar de capturar espectros, almacenarlos donde corresponda y esperar a que el volumen de información capturado sea suficiente como para poder crear un modelo PCA aceptable. A priori, y a falta de comprobaciones más robustas, parece razonable suponer que un número cercano a 10.000 espectros (equivalente a 110 pesadas * 90 espectros/pesada) pueda ser una cantidad suficiente para crear un modelo PCA adecuado para un solo tipo de fórmula. El número de componentes principales, que de forma automática emplea el sistema para llevar a cabo los cálculos correspondientes, es un valor fijo que puede establecerse como parámetro de configuración antes de arrancar el sistema (ver apartado A2.1.3 del anexo 2). Como ejemplo, en las figuras A1.6 y A1.7 se muestra el aspecto del sistema cuando el mismo está en proceso de calibración.

A1.2.1.2) Periodo de predicción o control

Superado el periodo de entrenamiento, el sistema dispone ya de información para llevar a cabo sus predicciones. Los estadísticos que son determinados en esta fase, y que serán útiles para tomar una decisión dada, son 6: C_GLOBAL, C_LOCAL, H_GLOBAL, H_LOCAL, T(MAX_MED) y T_outliers. Debe señalarse que estos estadísticos serán calculados con cada pesada considerando que cada fórmula de referencia tiene su propio modelo PCA (establecido previamente durante el periodo de entrenamiento). A continuación, se describe brevemente cada uno de ellos.

¹⁰ En el apéndice A.5 de Naes et al. (2007) pueden consultarse, si se desea, los fundamentos del método de análisis PCA.

- **C_GLOBAL**

Este parámetro representa el porcentaje de espectros de una pesada dada que están separados del centro de su población por una distancia de Mahalanobis (Naes et al., 2007) inferior a un valor límite dado (H_{glim}). Este límite es característico de cada fórmula de referencia y es calculado durante el periodo de calibración por medio del subprograma “NIVEL_2.m” (ver apartado A4.1.6 del anexo 4). Por el momento, el sistema está configurado para que el valor de H_{glim} sea determinado teniendo presente que dicha distancia debe abarcar al 95% de la población de espectros del colectivo de calibración. Ese porcentaje puede ser cambiado por el usuario, si así se desea, actuando sobre el parámetro de entrada “ENTRADA.limit1” (ver apartado A2.1.1 del anexo 2). En la figura A1.9 se muestra gráficamente el significado de H_{glim} haciendo uso de los “scores”¹¹ de un modelo PCA tomado como ejemplo.

- **C_LOCAL**

Este parámetro representa el porcentaje de espectros de una pesada dada que están separados de sus vecinos por una distancia de Mahalanobis inferior al valor límite H_{vlim} (véase la figura A1.9 como ejemplo orientativo). De forma análoga al caso anterior, el valor de H_{vlim} es característico de cada fórmula de referencia y es calculado durante el periodo de calibración por medio del subprograma “NIVEL_2.m” (ver apartado A4.1.6 del anexo 4). Por el momento, el sistema está configurado para calcular H_{vlim} teniendo en cuenta que dicha distancia debe ser capaz de abarcar normalmente, dentro del colectivo de entrenamiento, a un conjunto cualquiera de 95 espectros próximos

¹¹ Recuérdese que en un análisis PCA los “scores” representan las nuevas coordenadas de los datos originales (espectros en nuestro caso) respecto del sistema de componentes principales que puede deducirse.

(equivalente a $1,05 \cdot \text{ENTRADA.Nep}$, siendo ENTRADA.Nep el número de espectros tomados en cualquier pesada, ver apartado A2.1.1 del anexo 2).

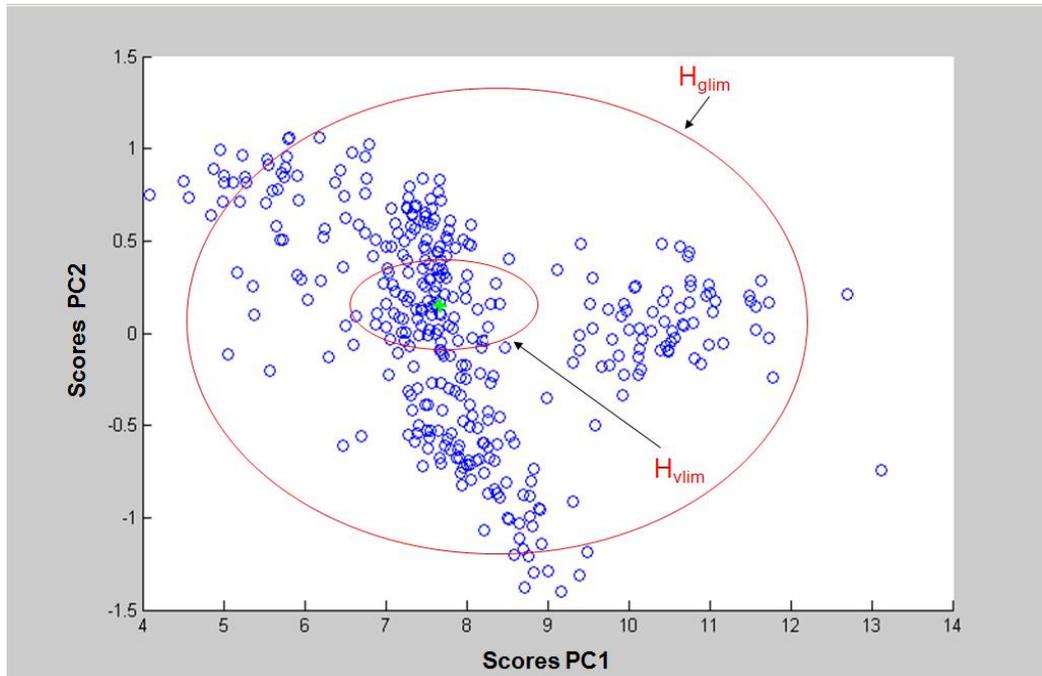


Figura A1.9: representación gráfica de los parámetros H_{glim} y H_{vlim} ligados al modelo PCA de una fórmula de referencia dada

- **H_GLOBAL y H_LOCAL**

Estos parámetros representan, respectivamente, los valores medios de las distancias de Mahalanobis global (H_g) y de vecinos (H_v) para un conjunto de espectros asociado a una pesada de pienso dada. Sus valores son calculados a partir del subprograma "NIVEL_3.m" (véase el apartado A4.1.7 del anexo 4).

- **T(MAX_MED) y T_outliers**

Si para un conjunto de "scores" hacemos el siguiente cálculo:

$$T_{pi} = \frac{U_{pi} - \overline{U_P}}{\sigma_{UP}},$$

la variable T_{pi} representa un valor auto-escalado de U_{pi} (valor del “score” i en la componente principal P). Nótese que $\overline{U_p}$ es el valor medio de los “scores” de cada componente del modelo PCA y σ_{UP} es la desviación típica de dichos “scores”.

Teniendo presente lo anterior, el sistema de control diseñado (a través del subprograma “NIVEL_3.m”) calcula para cada pesada en la fase de predicción (componente a componente) los valores absolutos de T_{pi} . En este contexto, el parámetro T(max_med) representa el valor máximo de entre los valores medios de T_{pi} que han sido obtenidos con cada componente P . El parámetro “T_outliers” representa el porcentaje máximo de “scores”, de entre todas las componentes principales, que tiene un valor T_{pi} anómalo. Bajo el supuesto de normalidad en la distribución de los datos, puede asumirse que cualquier T_{pi} es anómalo si su valor es superior a $2 \sim 2,5$. En nuestro caso, cualquier $T_{pi} > 2$ ha sido considerado como anómalo, no obstante, dicho valor límite puede ser cambiado por el usuario a través de la variable ENTRADA.limit2 (ver apartado A2.1.1 del anexo 2).

En la figura A1.10 se muestra un ejemplo de la salida que puede dar el sistema cuando está en fase de predicción (en los apartados A2.2 y A2.3 del anexo 2 se aportan más detalles sobre el contenido de los ficheros de Excel empleados en dicha salida). Los límites que se indican en la parte derecha de la figura son valores orientativos que pueden ser definidos por el usuario (tal y como se indica en el anexo 2, apartado A2.1.1), salvo en los casos de H_GLOBAL y H_LOCAL, que son fijados automáticamente por el sistema como se refiriera antes (H_{glim} y H_{vlim}).

De acuerdo con la figura A1.10, puede verse en el ejemplo tomado que C_GLOBAL = 100% (todos los espectros de la pesada analizada tienen una distancia de Mahalanobis al centro de su población inferior a H_{glim} , que en este caso vale 1,28), C_LOCAL = 100% (todos los espectros tienen vecinos cercanos por debajo de

H_{glim} , que en este caso vale 0,29), el valor $T(max_med)$ para todo el colectivo de “scores” es de $1,43 < 2$, y el porcentaje $T_outliers = 0\% < 20\%$. A la vista de los valores presentados, la calidad del pienso fabricado sería claramente “ACEPTABLE”, pues todos los parámetros de calidad evaluados son conformes con las características del colectivo de calibración al que está asociado. Por el momento, y como regla de decisión simple que podría ser modificada en un futuro a través del subprograma “est_res.m” (ver apartado A4.1.3 del anexo 4), se ha considerado como criterio de control que una pesada dada tiene calidad “NO ACEPTABLE” si C_GLOBAL o C_LOCAL no están por encima del 80%.

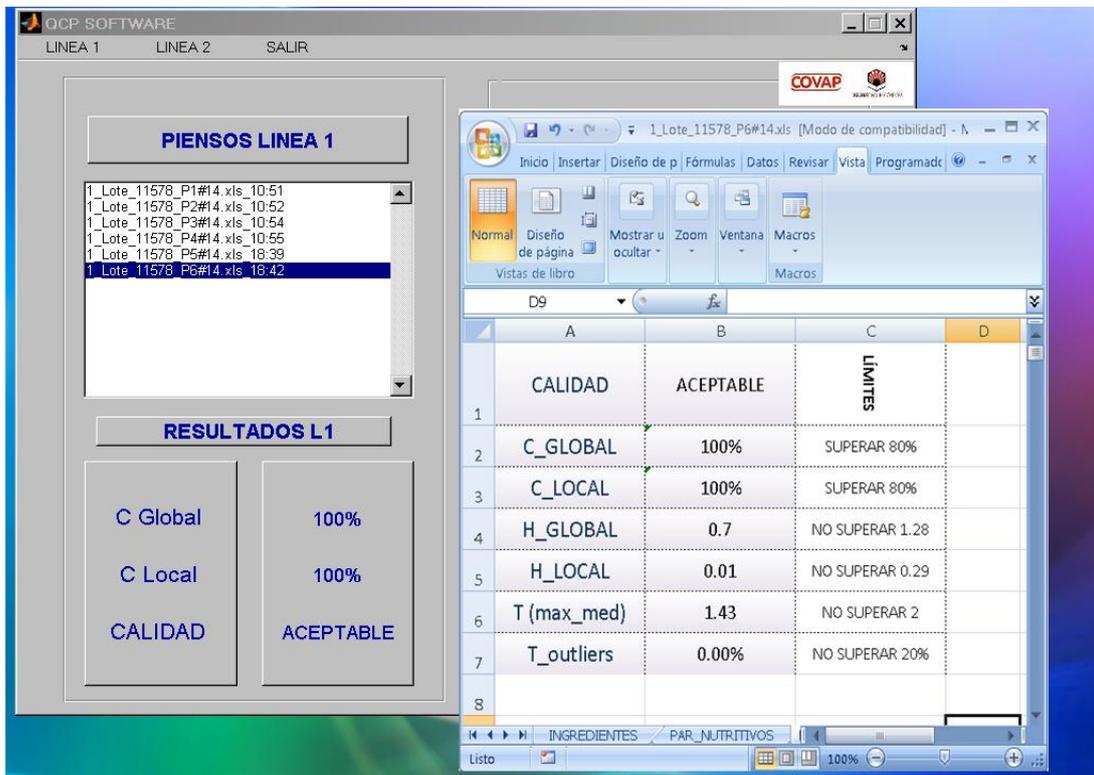


Figura A1.10: ejemplo de salida del sistema de control diseñado

Anexo 2: Ficheros de almacenamiento ligados a NIVEL_0L1.m

En el presente anexo se describe el contenido de los ficheros de almacenamiento gestionados directa o indirectamente (a través de algún subprograma) por el programa principal NIVEL_0L1.m, encargado fundamentalmente de las tareas de control y cálculo del sistema. Para facilitar el seguimiento de todos ellos, los ficheros serán mostrados por apartados, siguiendo el orden de la figura A2.1 (véase fundamentalmente la parte derecha).

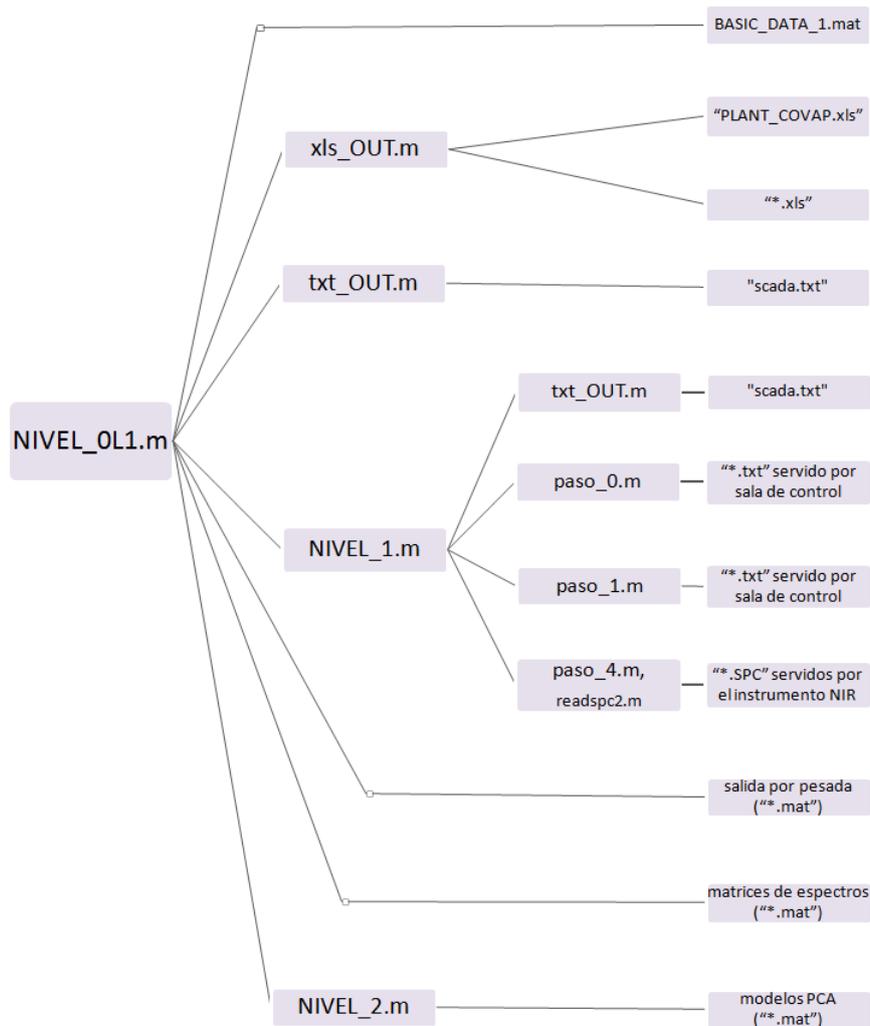


Figura A2.1: ficheros de almacenamiento relacionados con NIVEL_0L1.m

A2.1) Fichero “BASIC_DATA_1.mat”

Este fichero, con formato *.mat propio de MATLAB 7.0 (ver figura A2.2), es cargado directamente por NIVEL_0L1.m desde el directorio: “C:\NIRS1\”. Como medida de seguridad, existe una copia de reserva del mismo (BASIC_DATA_1_2.mat) que puede ser usada automáticamente por el programa principal para restaurar los valores iniciales de configuración ante cualquier daño.

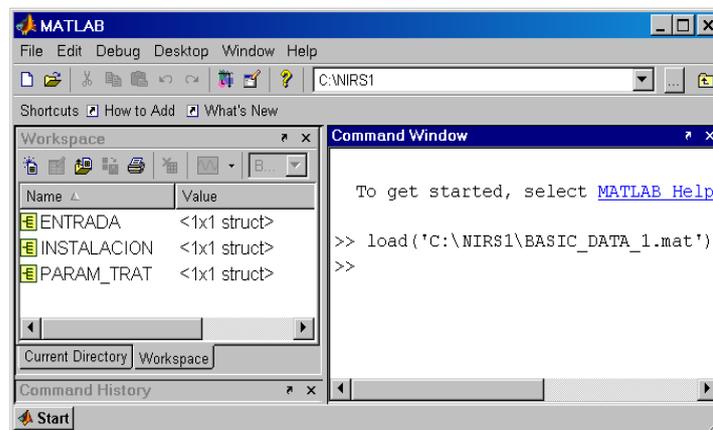


Figura A2.2: aspecto del contenido del fichero BASIC_DATA_1.mat

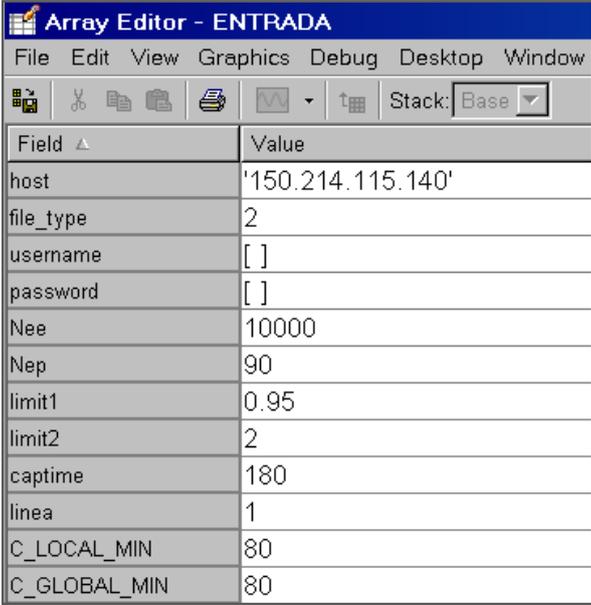
Puede destacarse de BASIC_DATA_1.mat que en él se almacena la información relativa a ciertos parámetros de configuración que son básicos para el funcionamiento de todo el sistema. Tal información se encuentra alojada en tres estructuras de datos cuyos nombres son (ver figura A2.2): ENTRADA, INSTALACION y PARAM_TRAT. El contenido de cada estructura se indica en lo que sigue.

A2.1.1) ENTRADA

Esta estructura de datos tiene los siguientes campos (ver figura A2.3):

- ENTRADA.host: variable que contiene la dirección IP para acceder por protocolo FTP a un servidor remoto que pueda suministrar información de

interés. Merece comentarse que en la actualidad esta variable, junto con otras que se definen justo a continuación (ENTRADA.host, ENTRADA.file_type, ENTRADA.username y ENTRADA.password), no está en uso pero ha sido creada y mantenida en previsión de desarrollos futuros.



Field ▲	Value
host	'150.214.115.140'
file_type	2
username	[]
password	[]
Nee	10000
Nep	90
limit1	0.95
limit2	2
captime	180
linea	1
C_LOCAL_MIN	80
C_GLOBAL_MIN	80

Figura A2.3: campos de la variable ENTRADA

- ENTRADA.file_type: tipo de fichero (binario o ASCII) que se intercambia a través de FTP.
- ENTRADA.username: usuario que realiza el intercambio ftp.
- ENTRADA.password: contraseña requerida para llevar a cabo el intercambio ftp.
- ENTRADA.Nee: nº de espectros requeridos para completar la fase de entrenamiento (nivel 1) de una fórmula de pienso dada. Como ejemplo, en la figura A2.3 se ha tomado ENTRADA.Nee = 100000.
- ENTRADA.Nep: nº de espectros medidos en cada pesada.

- ENTRADA.limit1: porcentaje de espectros (expresado en tanto por 1) más cercanos al centro de la población que se toman por diseño, de la nube original, para determinar la “amplitud” o “radio” de dicha nube.
- ENTRADA.limit2: valor límite aceptado para T (Student).
- ENTRADA.capttime: tiempo máximo (segundos) de captura espectral por pesada.
- ENTRADA.linea: número de línea en la que se instala el equipo (1, 2,...n).
- ENTRADA.C_LOCAL_MIN: valor mínimo permitido a C_LOCAL.
- ENTRADA.C_GLOBAL_MIN: valor mínimo permitido a C_GLOBAL. Indirectamente, este valor también se usa para definir el límite de "T_outliers" (ver apartado A1.2.1.2 y subprograma “est_res.m” en el epígrafe A4.1.3 del anexo 4), de tal forma que: $T_outliers = 100 - ENTRADA.C_GLOBAL_MIN$.

A2.1.2) INSTALACION

Esta estructura de datos consta de los siguientes campos (ver figura A2.4):

- INSTALACION.DIR1: ruta completa del directorio en el que se almacena NIVEL_OL1.m y todos los ficheros y carpetas gestionados por dicho programa (como ejemplo, en la figura A2.4 se puede comprobar que $INSTALACION.DIR1 = 'C:\NIRS1\'$).
- INSTALACION.DIR2: ruta completa del directorio en el que se almacenan todas las carpetas que de forma particular y separada guardan toda la información relativa a cada fórmula de pienso. Dicha ruta por defecto es $'C:\NIRS1\CARPETAS\'$.

Field	Value
DIR1	'C:\NIRS1'
DIR2	'C:\NIRS1\CARPETAS'
DIR3	'C:\NIRS1\temp_ftp'
DIR4	'C:\NIRS1\temp_spec'
DIR5	'C:\NIRS1\Automata'

Figura A2.4: campos de la variable INSTALACION

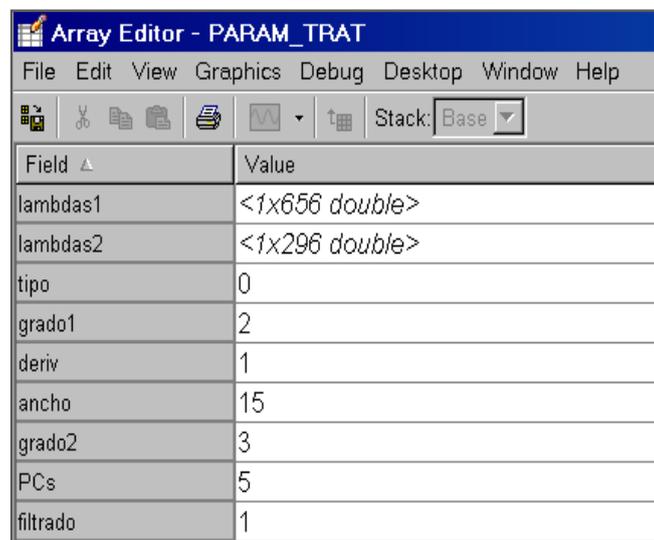
- INSTALACION.DIR3: ruta completa del directorio que sirve de soporte para llevar a cabo el intercambio de ficheros de formulación entre las aplicaciones NIVEL_0L1.m y control_menu.m. Paralelamente, podría ser empleado como soporte para la transferencia de ficheros por vía FTP si ello fuese requerido. Por defecto se establece que `INSTALACION.DIR3 = 'C:\NIRS1\temp_ftp\'`.
- INSTALACION.DIR4: ruta completa del directorio que sirve para alojar toda la información espectral suministrada por el espectrofotómetro NIR en formato *.SPC. Por defecto, `INSTALACION.DIR4 = 'C:\NIRS1\temp_spec\'`.
- INSTALACION.DIR5: ruta completa del directorio empleado para intercambiar información de rutina con el autómata que controla el mecanismo automático de paso de referencias. Por defecto, `INSTALACION.DIR5 = 'C:\NIRS1\Automata\'`.

A2.1.3) PARAM_TRAT

Esta estructura de datos contiene los siguientes campos (ver figura A2.5):

- `PARAM_TRAT.lambdas1`: conjunto de longitudes de onda de captura del espectrofotómetro empleado.

- PARAM_TRAT.lambdas2: conjunto de longitudes de onda de la región NIR finalmente utilizadas.
- PARAM_TRAT.tipo: clase de tratamiento que se aplica a los espectros antes de llevar a cabo cualquier análisis. Su valor puede ser: 0 (sin tratamiento), 1 (se aplica SNV), 2 (para SNV+"detrend"), 3 (derivada+SNV+"detrend") ó 4 (SNV+"detrend"+derivada).



Field	Value
lambdas1	<1x656 double>
lambdas2	<1x296 double>
tipo	0
grado1	2
deriv	1
ancho	15
grado2	3
PCs	5
filtrado	1

Figura A2.5: campos de la variable PARAM_TRAT

- PARAM_TRAT.grado1: grado del polinomio usado con "detrend" (como ejemplo, grado1 = 2 según la figura A2.5).
- PARAM_TRAT.deriv: orden de la derivada aplicada.
- PARAM_TRAT.ancho: anchura del segmento de derivación.
- PARAM_TRAT.grado2: grado del polinomio de ajuste del segmento tratado.
- PARAM_TRAT.PCs: número de componentes fijadas para crear cualquier modelo PCA.

- PARAM_TRAT.filtrado: variable auxiliar que sirve para mejorar la velocidad de cálculo en la estimación de Hglim y Hvglim (ver subprograma NIVEL_2.m).

A2.2) Fichero “PLANT_COVAP.xls”

Este fichero tiene formato de Microsoft Excel 97/2003 (ver figura A2.6) y es cargado por NIVEL_0L1.m desde el directorio “C:\NIRS1\” haciendo uso del subprograma “xls_OUT.m”.

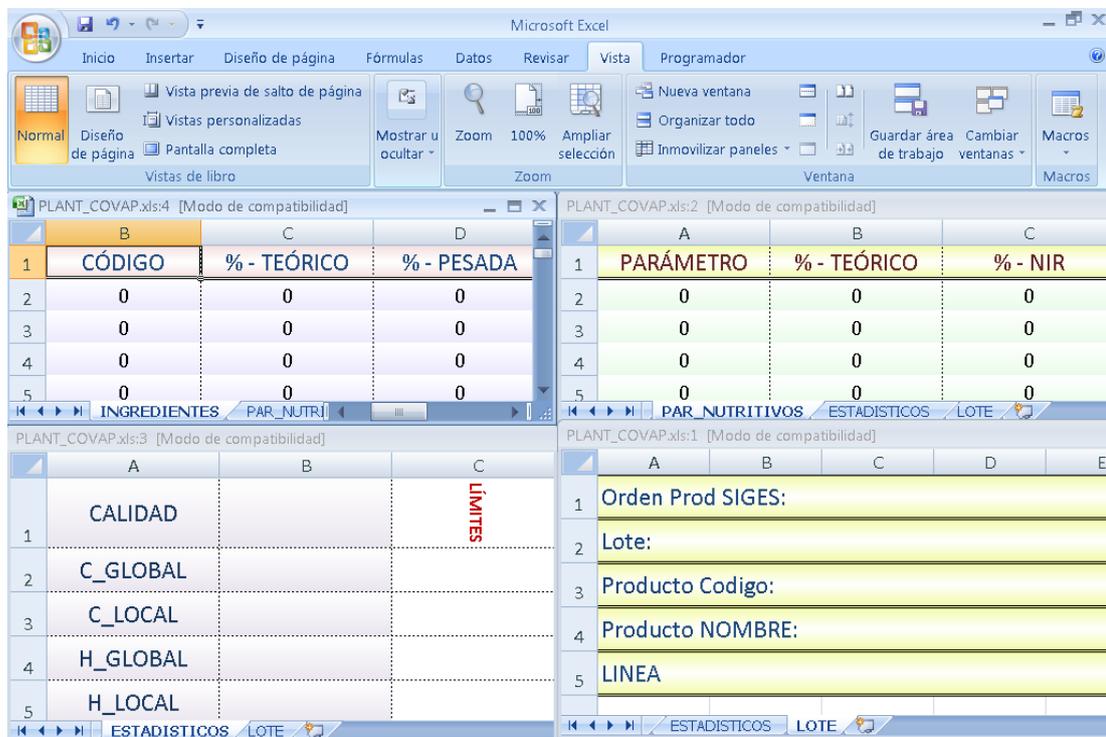


Figura A2.6: aspecto general del contenido del fichero PLANT_COVAP.xls

Como en el caso anterior, existe una copia de seguridad del mismo (PLANT_COVAP2.xls) que sería usada automáticamente por el sistema ante cualquier daño en el fichero original. La utilidad de PLANT_COVAP.xls reside en que funciona como una plantilla base que puede ser cargada y modificada por el sistema para almacenar toda la información que se desee sobre los resultados obtenidos en

cada control de calidad realizado. En principio, dichos resultados pueden ser alojados en cuatro hojas diferentes: INGREDIENTES, PAR_NUTRITIVOS, ESTADISTICOS Y LOTE (ver figura A2.6) según sea el tipo de valor manejado. No obstante, la flexibilidad de M. Excel facilita la creación de nuevas hojas, o la expansión de las ya existentes, para albergar nuevos resultados. A continuación, se hace una breve descripción sobre el contenido de cada hoja.

A2.2.1) HOJA “INGREDIENTES”

El aspecto de esta hoja es como el mostrado en la figura A2.7. En ella puede verse que existen 6 columnas para alojar la información referente a los ingredientes empleados en cada fórmula particular.

	A	B	C	D	E	F
1	INGREDIENTE	CÓDIGO	% - TEÓRICO	% - PESADA	% - NIR	INF - PESADA
2	...	0	0	0	0	0
3	...	0	0	0	0	0
4	...	0	0	0	0	0
5	...	0	0	0	0	0
6	...	0	0	0	0	0
7	...	0	0	0	0	0
8	...	0	0	0	0	0
9	...	0	0	0	0	0
10	...	0	0	0	0	0
11	...	0	0	0	0	0
12	...	0	0	0	0	0
13	...	0	0	0	0	0
14	...	0	0	0	0	0
15						

Figura A2.7: aspecto general de la hoja INGREDIENTES de PLANT_COVAP.xls

De izquierda a derecha, y por orden, las columnas establecidas sirven para indicar el nombre de los INGREDIENTES, su CÓDIGO de uso en la planta, el % TEÓRICO que se espera emplear en una fórmula dada, el % real (medido por

básculas) que se emplea en cada PESADA, el % NIR que se estima (por implementar en trabajos futuros), y la INFormación de PESADA (número de pesada actual y número de pesadas que componen el lote activo).

A2.2.2) HOJA “PAR_NUTRITIVOS”

La apariencia de esta hoja es como la mostrada en la figura A2.8. Su uso está previsto que sea desarrollado en trabajos futuros para guardar en cada pesada la composición teórica, y la predicción NIR, de aquellos parámetros nutritivos que puedan ser interés (proteína, fibra, humedad, etc.). De ahí que en principio esta hoja cuente con tres columnas dedicadas, respectivamente, al nombre, % TEÓRICO y % NIR predicho para cada PARÁMETRO analizado en una fórmula de pienso dada.

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	PARÁMETRO	% - TEÓRICO	% - NIR					
2	0	0	0					
3	0	0	0					
4	0	0	0					
5	0	0	0					
6	0	0	0					
7	0	0	0					
8	0	0	0					
9	0	0	0					
10	0	0	0					
11	0	0	0					
12	0	0	0					
13	0	0	0					
14	0	0	0					
15								

Figura A2.8: aspecto general de la hoja PAR_NUTRITIVOS de PLANT_COVAP.xls

A2.2.3) HOJA “ESTADISTICOS”

En la figura A2.9 se presenta como ejemplo una imagen de la hoja ESTADISTICOS . Su uso está contemplado para albergar un resumen de los valores estadísticos que puedan ser de mayor utilidad para decidir si una pesada dada ha sido correctamente fabricada. Por el momento, en dicha hoja se incluyen los valores de C_GLOBAL, C_LOCAL, H_GLOBAL, H_LOCAL, T(MAX_MED) y T_outliers (ver apartado A1.2.1.2 del anexo 1) y los valores límite que no deben superar dichos parámetros para que un pienso dado tenga una calidad aceptable.

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	CALIDAD		LÍMITES					
2	C_GLOBAL							
3	C_LOCAL							
4	H_GLOBAL							
5	H_LOCAL							
6	T (max_med)							
7	T_outliers							
8								
9								
10								

Figura A2.9: aspecto general de la hoja ESTADISTICOS de PLANT_COVAP.xls

A2.2.4) HOJA “LOTE”

En la figura A2.10 se presenta el aspecto de la hoja LOTE. En ella se guarda de forma sucinta la información básica de fabricación de una fórmula dada (con objeto de favorecer la trazabilidad del producto): orden de fabricación, número de lote, código y nombre del pienso fabricado y línea de producción.

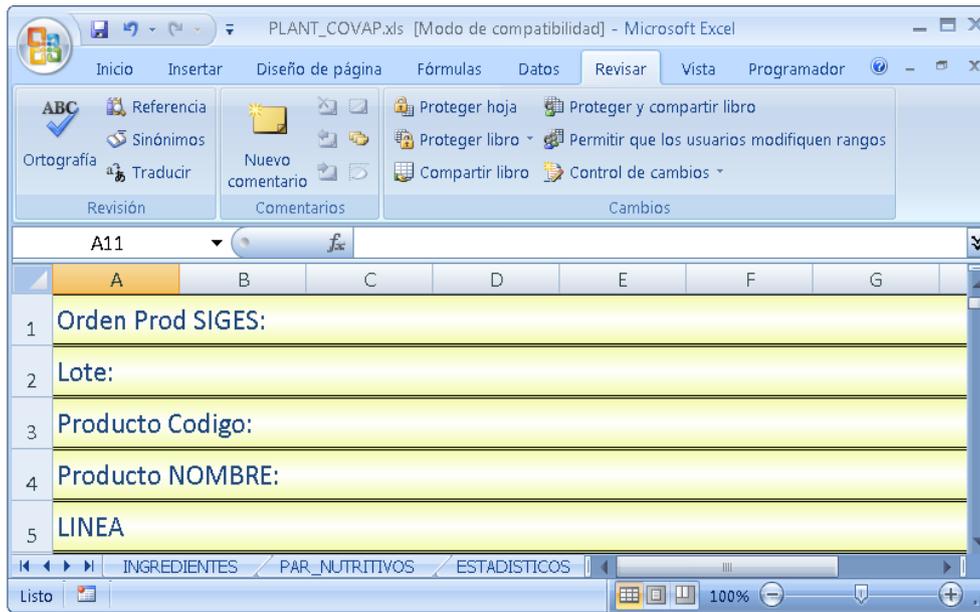


Figura A2.10: aspecto general de la hoja LOTE de PLANT_COVAP.xls

A2.3) Ficheros “.xls” creados por NIVEL_0L1.m

Estos ficheros con formato de Microsoft Excel 97/2003 (ver figura A2.11) son creados por NIVEL_0L1.m haciendo uso del subprograma “xls_OUT.m” y del archivo PLANT_COVAP.xls, que es usado como plantilla modificable en la que es posible guardar la información de referencia (composición) más relevante de una pesada dada (véase el apartado anterior A2.2).

En principio, estos ficheros son guardados en el directorio: “C:\NIRS1\CARPETAS**_ _ _*\OTROS\Resultados\”, en donde el símbolo **_ _ _* representa el nombre específico de la carpeta ligada a cada tipo de pienso fabricado. Cabe notar, que el nombre de dicha carpeta es único para cada formulación de pienso y viene dado por un código de 3 números (como por ejemplo este: 49.048254_83.932_61.552), que es generado automáticamente por el subprograma “pasos_2_3.m” (ver apartado A4.1.1.4 en el anexo 4) a partir de ciertas ecuaciones que emplean, como variables independientes, el porcentaje de ingredientes de cada pienso.

En lo que se refiere a la denominación de los ficheros *.xls, señalar que cada pesada de pienso va a tener asociado un fichero de salida *.xls cuyo nombre particular es generado también de forma sistemática para facilitar su seguimiento. Como ejemplo, indicar que un fichero de este tipo puede tener un nombre como el siguiente: “1_Lote_11578_P10#14.xls”, en donde el primer número (1) indica la línea en donde fue fabricada la pesada, el segundo número (11578) hace referencia al lote de fabricación (generado por la sala de control y diferente para cada lote), el tercero (10) representa el número de pesada dentro del lote, y el cuarto (14) es el número total de pesadas que componen el lote.

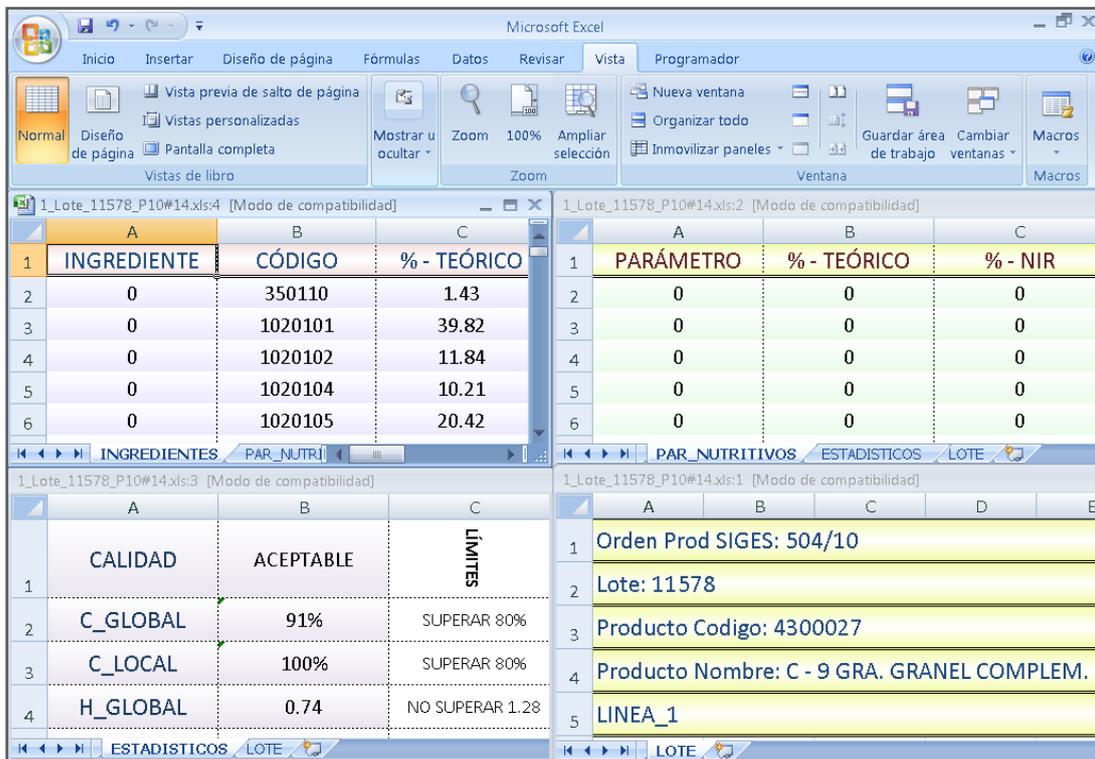


Figura A2.11: aspecto general de un fichero *.xls creado a partir de PLANT_COVAP.xls

A2.4) Fichero “scada.txt”

Este fichero tiene formato de texto (*.txt) y es controlado por NIVEL_0L1.m desde el directorio “C:\NIRS1\Automata\” haciendo uso del subprograma

“txt_OUT.m” (ver apartado A4.1.1.1 del anexo 4). La función de este fichero es la de disponer de un espacio de memoria que pueda ser accesible tanto para el programa NIVEL_0L1.m como para la aplicación SCADA que pueda instalarse en el futuro para controlar al autómata¹². De esta forma, el software desarrollado y la aplicación SCADA del autómata pueden intercambiar información y ser compatibles. El contenido del mismo (ver figura A2.12) se limita, por el momento, a una línea de texto en la que se refleja el valor de dos variables (Estado y Calidad) que sirven para indicar, respectivamente, la posibilidad de “APAGAR/NO APAGAR” el espectrofotómetro y la calidad del último pienso fabricado (“ACEPTABLE”, “NO ACEPTABLE” o “CALIBRANDO”).

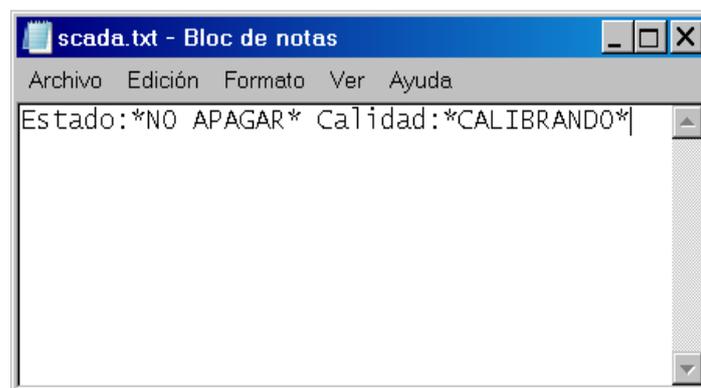


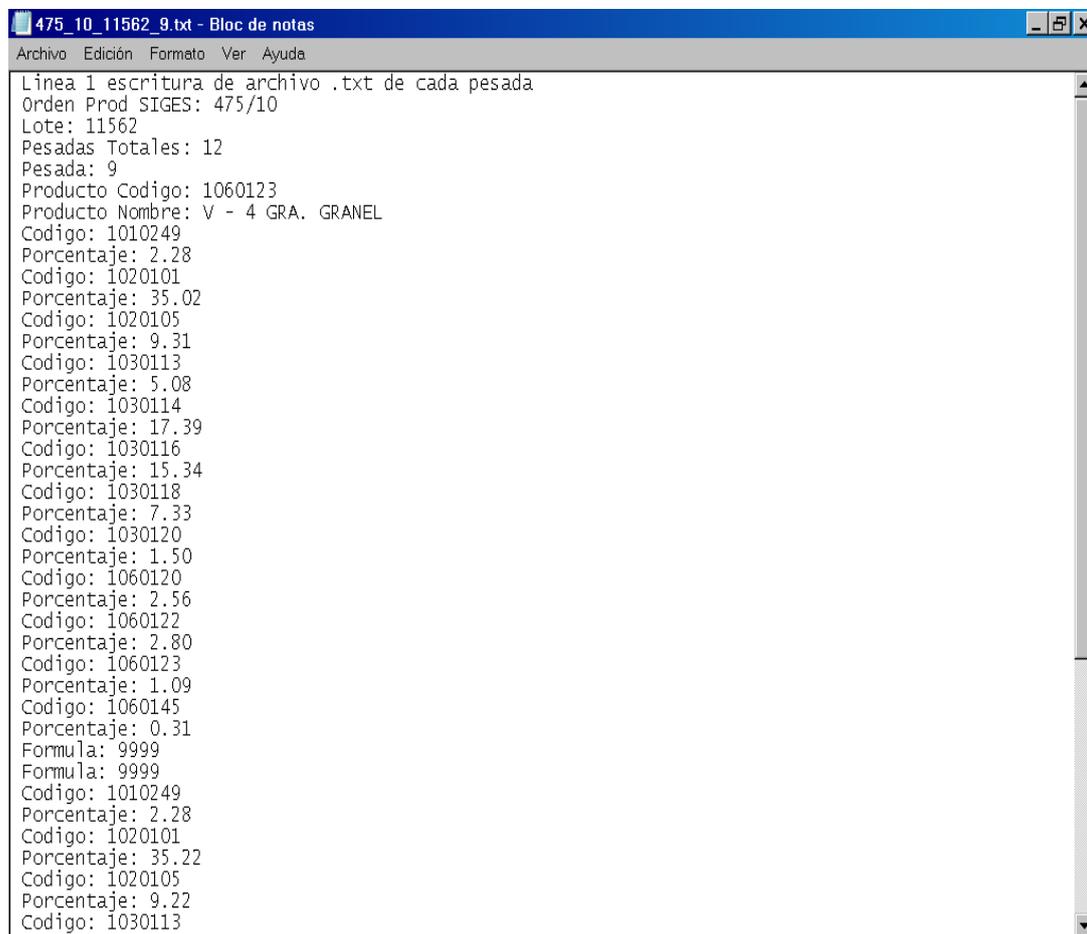
Figura A2.12: aspecto del contenido del fichero “scada.txt”

A2.5) Fichero “*.txt” servido por la sala de control

Este fichero tiene formato de texto y es gestionado por NIVEL_0L1.m desde el directorio “C:\NIRS1\temp_ftp\” por medio de los subprogramas “paso_0 .m” y “paso_1.m”. En él se almacenan los datos de fabricación de una pesada de pienso dada (ver figura A2.13) antes de que la misma pase por el punto de control NIR.

¹² La implantación y control del autómata referido (véase su imagen en el apartado 2.3) queda fuera de los objetivos del Trabajo aquí presentado.

El nombre de este fichero es distinto para cada pesada y es generado de forma automática por los servidores de la sala de control. En la práctica, dicho nombre no es relevante para llevar a cabo la gestión del fichero. En cuanto al contenido del mismo (ver figura A2.13), puede señalarse que hay un primer apartado de presentación (encabezado de 7 filas) en el que se incluyen, por orden de aparición, los siguientes campos: línea de fabricación activa, orden de producción dada, lote de fabricación, número total de pesadas que componen el lote, código del producto y nombre.



```
Línea 1 escritura de archivo .txt de cada pesada
Orden Prod SIGES: 475/10
Lote: 11562
Pesadas Totales: 12
Pesada: 9
ProductoCodigo: 1060123
ProductoNombre: V - 4 GRA. GRANEL
Codigo: 1010249
Porcentaje: 2.28
Codigo: 1020101
Porcentaje: 35.02
Codigo: 1020105
Porcentaje: 9.31
Codigo: 1030113
Porcentaje: 5.08
Codigo: 1030114
Porcentaje: 17.39
Codigo: 1030116
Porcentaje: 15.34
Codigo: 1030118
Porcentaje: 7.33
Codigo: 1030120
Porcentaje: 1.50
Codigo: 1060120
Porcentaje: 2.56
Codigo: 1060122
Porcentaje: 2.80
Codigo: 1060123
Porcentaje: 1.09
Codigo: 1060145
Porcentaje: 0.31
Formula: 9999
Formula: 9999
Codigo: 1010249
Porcentaje: 2.28
Codigo: 1020101
Porcentaje: 35.22
Codigo: 1020105
Porcentaje: 9.22
Codigo: 1030113
```

Figura A2.13: aspecto del contenido del “*.txt” servido por la sala de control

Tras el encabezado, aparece un segundo bloque de datos en el que se integran los datos reales de formulación de ingredientes (medidos con básculas).

Dichos datos contienen el código numérico que identifica a cada ingrediente y el porcentaje de los mismos dentro del pienso. El número de filas que componen este bloque es variable y depende del número de ingredientes empleados.

Tras el segundo bloque, y separado por dos filas de control en las que aparece el texto "Formula: 9999" (ver figura A2.13), aparece un tercer bloque de datos en el que se incluyen los datos teóricos de formulación del pienso. De forma similar al bloque anterior, en éste se registran también los datos relativos al código de cada ingrediente y el porcentaje (esta vez teórico) de los mismos.

A2.6) Ficheros "*.SPC" servidos por el instrumento NIR

Cada espectro recogido por el instrumento NIR seleccionado (CORONA 45 VISNIR) es guardado de forma independiente en un fichero al uso cuyo formato (de tipo binario y extensión SPC, ver figura A2.14) viene dado por el software de instalación del instrumento NIR (software CORA). La ruta original de acceso a los mismos se puede expresar genéricamente como: "C:\NIRS1\temp_spec*****", en donde el símbolo ***** representa un número de 8 dígitos correspondientes al año (4 dígitos), mes (2 dígitos) y día (2 dígitos) en los que se recogió el espectro.

La gestión de estos archivos es realizada en último término por NIVEL_0L1.m a través de los subprogramas "readspc2.m" (encargado de la conversión de los datos binarios de un fichero *.SPC dado. Véase dicho subprograma para tener mayor detalle), de "paso_4.m" (responsable de crear la matriz de "CAPTURA" de espectros en una pesada cualquiera) y de "NIVEL_1.m" (encargado de guardar y redistribuir en formato MATLAB y *.SPC la información espectral recogida en cada una pesada completa). Tras el procesado de los ficheros *.SPC se puede encontrar una copia de los mismos en la ruta genérica: "C:\NIRS1\CARPETAS**_**\OTROS\Auxiliar\", en donde el símbolo **_** representa el nombre particular de la carpeta

asociada a cada tipo de pienso fabricado (tal y como se mencionaba en el apartado A2.3).

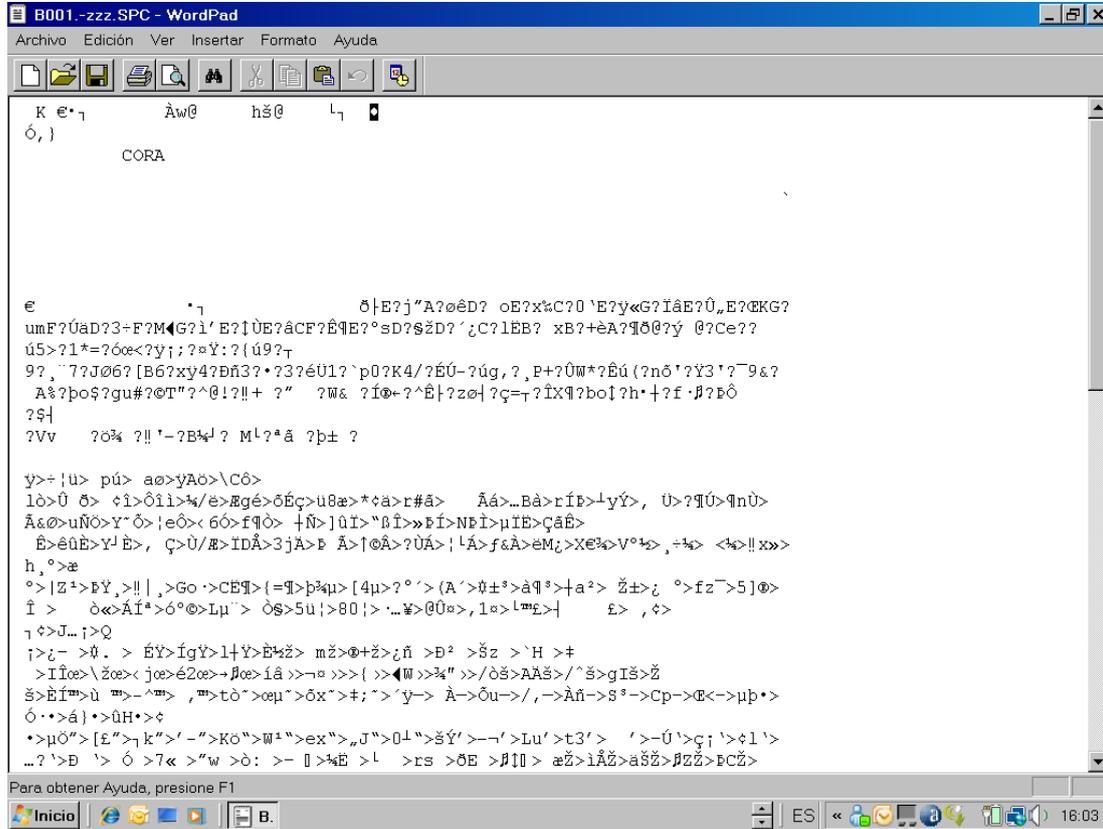


Figura A2.14: aspecto del contenido de un fichero binario “*.SPC” cuando es abierto con un editor de textos

A2.7) Ficheros de salida por pesada (“*.mat”)

Estos ficheros, con formato propio de MATLAB 7.0 (*.mat, ver figura A2.15), son creados directamente por NIVEL_0L1.m y guardados en la ruta genérica: “C:\NIRS1\CARPETAS**_ _ _**\MATLAB\Espectros\” (ver como ejemplo la ruta mostrada en la parte superior de la figura A2.15). Su contenido es, en parte, muy similar al de los ficheros de Excel creados para las pesadas (ver apartados A2.2 y A2.3), pero su formato quizás es más adecuado para facilitar desarrollos futuros. Como en ocasiones anteriores, el símbolo ****_ _ _**** representa el nombre específico de la carpeta ligada a cada tipo de pienso fabricado.

Cabe destacar, que en este tipo de ficheros se almacena de forma compacta (y fácilmente accesible para MATLAB), la información más importante que haya podido generarse en el control de calidad de una pesada dada. Dicha información se encuentra alojada en 3 estructuras de datos y una variable de tipo “cell array” cuyos nombres son (ver figura A2.15, parte izquierda): GLOBAL_DATA, PAR_NUTR, SAL_ESTAD y SAL_OTROS. El contenido de estas “macro-variables” es descrito a continuación.

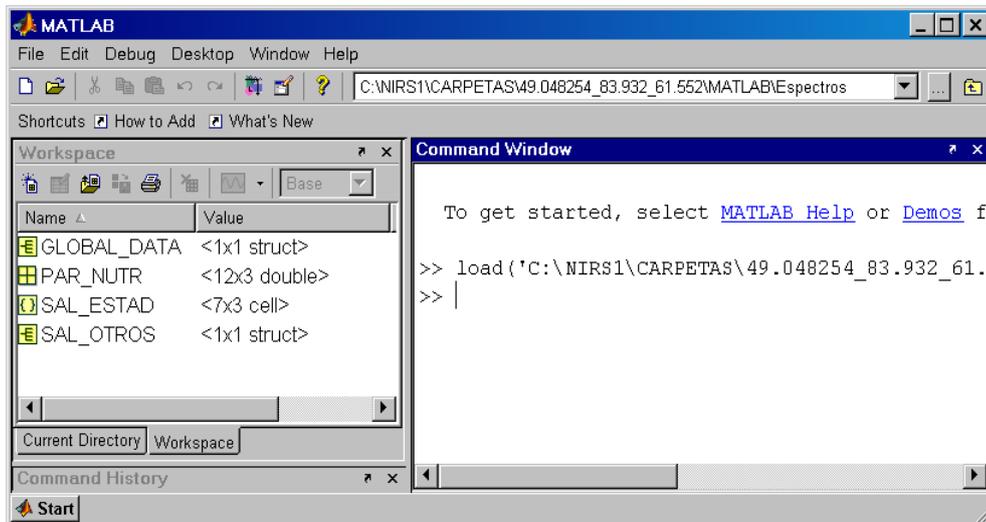


Figura A2.15: aspecto del contenido de un fichero de salida *.mat ligado a una pesada de pienso particular

A2.7.1) GLOBAL_DATA

La estructura GLOBAL_DATA contiene a su vez tres campos: GLOBAL_DATA.Espectros, GLOBAL_DATA.Referencia y GLOBAL_DATA.Inf.xls (ver figura A2.16, parte superior izquierda).

En el campo GLOBAL_DATA.Espectros se almacena la información espectral recogida durante una pesada completa. Este campo cuenta con dos subcampos: GLOBAL_DATA.Espectros.cabecera y GLOBAL_DATA.Espectros.data (ver figura A2.16, parte superior derecha) en los que se guardan, respectivamente, el conjunto

de longitudes de onda bajo las que opera el espectrofotómetro empleado y los valores de las absorbancias de todos los espectros captados en dicha pesada (ver figura A2.16, parte inferior).

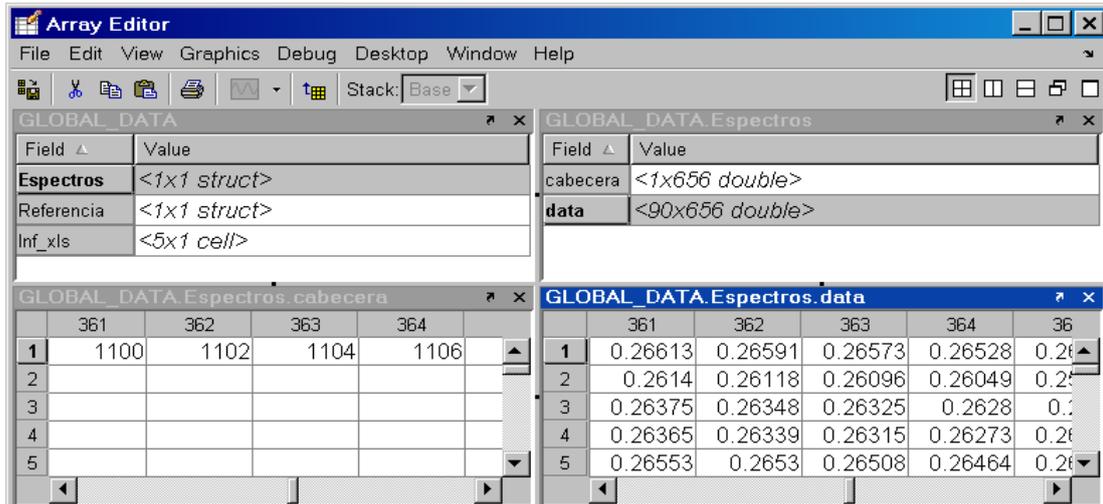


Figura A2.16: aspecto de algunos de los contenidos almacenados en la estructura de datos GLOBAL_DATA

En el campo GLOBAL_DATA.Referencia (ver figura A2.17) se almacena la información referente a la composición del pienso. Su contenido es homólogo al de la hoja “INGREDIENTES” del fichero Excel generado para una pesada dada (ver apartados A2.2 y A2.3). En este caso, las variables “Ingredientes”, “Código”, “%Teórico”, “%Pesada”, “%NIR” e “Inf.Pesada” (definidas en el subapartado A2.2.1) son alojadas en dos subcampos: GLOBAL_DATA.Referencia.Cabecera (incluye el nombre de las variables, ver figura A2.17, parte inferior izquierda) y GLOBAL_DATA.Referencia.Data (en el que se alojan ordenadamente los datos vinculados a dichas variables, ver figura A2.17, parte inferior derecha).

Por último, en el campo GLOBAL_DATA.Inf_xls (ver figura A2.18) se guarda información general sobre el lote al que pertenece la pesada de pienso fabricada. Dicha información es homóloga a la que puede ser guardada en los ficheros *.xls referidos en apartados anteriores (ver A2.2.4 y A2.3).

The screenshot shows the Array Editor interface with four panels. The top-left panel shows the structure of GLOBAL_DATA with fields: Espectros (<1x1 struct>), Referencia (<1x1 struct>), and Inf_xls (<5x1 cell>). The top-right panel shows GLOBAL_DATA.Referencia with fields: Cabecera (<1x6 cell>) and Data (<12x6 cell>). The bottom-left panel shows GLOBAL_DATA.Referencia.Cabecera as a 13x6 table with headers: 'Ingredientes', 'Código', '%Teórico', '%Pesada', '%NIR', 'Inf. Pesada'. The bottom-right panel shows GLOBAL_DATA.Referencia.Data as a 13x6 table of numerical values.

	1	2	3	4	5	6
1	'Ingredientes'	'Código'	'%Teórico'	'%Pesada'	'%NIR'	'Inf. Pesada'
2						
3						
4						
5						
6						
7						
8						
9						
10						
11						
12						
13						

	1	2	3	4	5	6
1	'...'	350110	1.43	1.42	1.42	14
2	'...'	1020101	39.82	39.8	39.8	25
3	'...'	1020102	11.84	11.84	11.84	0
4	'...'	1020104	10.21	10.21	10.21	0
5	'...'	1020105	20.42	20.41	20.41	0
6	'...'	1030117	12.29	12.28	12.28	0
7	'...'	1060120	2.04	2.04	2.04	0
8	'...'	1060121	0.03	0.03	0.03	0
9	'...'	1060122	1.05	1.09	1.09	0
10	'...'	1060123	0.41	0.41	0.41	0
11	'...'	1060139	0.41	0.41	0.41	0
12	'...'	1060194	0.05	0.05	0.05	0
13						

Figura A2.17: aspecto de los contenidos almacenados en el campo GLOBAL_DATA.Referencia

The screenshot shows the Array Editor interface for GLOBAL_DATA.Inf_xls. It displays a 12x2 table with the following content:

	1	2
1	'Orden Prod SIGES: 504/10'	
2	'Lote: 11578'	
3	'Producto Codigo: 4300027'	
4	'Producto Nombre: C - 9 GRA. GRANEL COMPLEM. MONTANERA	
5	'LINEA_1'	
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		

Figura A2.18: aspecto de algunos de los contenidos almacenados en la estructura de datos GLOBAL_DATA

A2.7.2) PAR_NUTR

La estructura PAR_NUTR se muestra en la figura A2.19. Su contenido es idéntico al indicado con la hoja "PAR_NUTRITIVOS" en el apartado A2.2.2. Como en aquél caso, su uso está previsto que sea desarrollado en trabajos futuros para

guardar en cada pesada la composición teórica, y la predicción NIR, de aquellos parámetros nutritivos que puedan ser de interés (proteína, fibra, humedad, etc.). En ella se contemplan, por el momento, dos campos: PAR_NUTR.cabecera (en el que se alojan los nombres de las variables asociadas a esta estructura, ver figura A2.19, parte central) y PAR_NUTR.data (en el que se guardan los valores de las variables tratadas, ver figura A2.19, parte inferior).

The image shows three windows from a software interface related to the PAR_NUTR data structure.

The top window, titled "PAR_NUTR", shows a list of fields and their values:

Field	Value
cabecera	<1x3 cell>
data	<12x3 double>

The middle window, titled "PAR_NUTR.cabecera", shows a grid with 11 columns and 4 rows. The first row contains the following values:

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	'PARAMETRO'	'%Teórico'	'%NIR'								
2											
3											
4											

The bottom window, titled "PAR_NUTR.data", shows a grid with 11 columns and 9 rows. The first row contains the following values:

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	0	0	0								
2	0	0	0								
3	0	0	0								
4	0	0	0								
5	0	0	0								
6	0	0	0								
7	0	0	0								
8	0	0	0								
9	0	0	0								

Figura A2.19: aspecto de la estructura de datos PAR_NUTR

A2.7.3) SAL_ESTAD

SAL_ESTAD es una variable de tipo “cell array” cuyo contenido queda mostrado como ejemplo en la figura A2.20. De forma análoga a como ocurre con la hoja ESTADISTICOS, de los ficheros *.xls descritos en los apartados A2.2 y A2.3, su uso está previsto para albergar un resumen de los valores estadísticos más importantes que puedan caracterizar una pesada de pienso. Por el momento, en dicha variable se incluyen los valores de C_GLOBAL, C_LOCAL, H_GLOBAL, H_LOCAL,

T(MAX_MED) y T_outliers, así como los límites que no deben ser superados para considerar que un pienso dado tenga una calidad aceptable.

	1	2	3	4
1	'CALIDAD'	'ACEPTABLE'	'LÍMITES'	
2	'C_GLOBAL'	'91%'	'SUPERAR 80%'	
3	'C_LOCAL'	'100%'	'SUPERAR 80%'	
4	'H_GLOBAL'	'0.74'	'NO SUPERAR 1.28'	
5	'H_LOCAL'	'0.02'	'NO SUPERAR 0.93'	
6	'T_MAX_MED'	'1.44'	'NO SUPERAR 2'	
7	'T_outliers'	'8.89%'	'NO SUPERAR 20%'	
8				

Figura A2.20: aspecto de la “cell array” SAL_ESTAD

A2.7.4) SAL_OTROS

La estructura SAL_OTROS está contemplada como “cajón de sastre” para guardar en ella otra información que pueda tener interés en el futuro pero que, en principio, no es tan relevante como la ya descrita con las anteriores variables GLOBAL_DATA, PAR_NUTR o SAL_ESTAD. Por el momento, contiene tres campos (ver figura A2.21): “T_values”, “date” y “línea”.

El campo “T_values” (ver función “T_calc ()” en el apartado A4.1.7 del anexo 4) es, a su vez, una estructura de datos compuesta por dos subcampos (ver figura A2.21, parte inferior): T_values.CT_COMP (variable que viene a representar, en cada componente principal, el porcentaje de “scores” que tienen un valor no demasiado alejado de su media) y T_values.CT_GLOBAL (valor mínimo de la variable T_values.CT_COMP). En cuanto a “línea” y “date”, señalar que estos campos vienen a indicar, respectivamente, la línea de fabricación y la fecha (incluyendo año, mes, día, hora, minuto y segundo) en la que se realizó el control de la pesada.

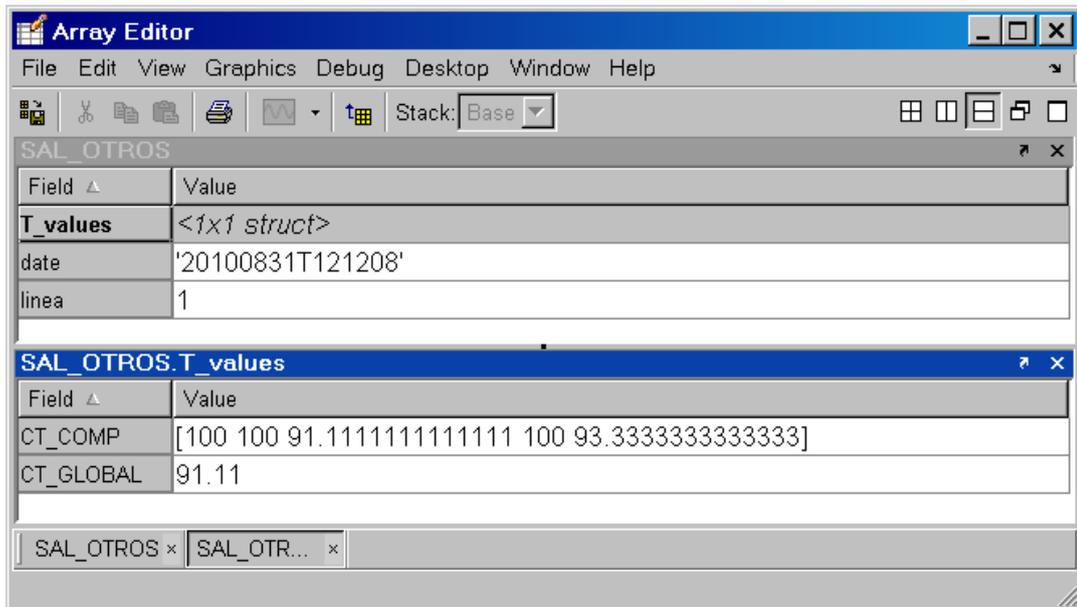


Figura A2.21: aspecto de la estructura de datos SAL_OTROS

A2.8) Ficheros de matrices de espectros (“*.mat”)

Estos ficheros tienen formato propio de MATLAB 7.0 (*.mat) tal y como se puede apreciar en la figura A2.22. Son creados directamente por NIVEL_OL1.m y guardados en el directorio genérico: “C:\NIRS1\CARPETAS**_**\MATLAB”. Como en apartados anteriores, el símbolo ****_**** representa el nombre específico de la carpeta ligada a cada tipo de pienso fabricado (ver la ruta mostrada en la parte superior de la figura A2.22). Se da la circunstancia además que, salvo por la extensión .mat, el nombre usado en cada caso para dicha carpeta es coincidente con el utilizado para denominar al fichero de la matriz de espectros (para el ejemplo de la figura A2.22, el nombre de este fichero es “47.541258_82.12_60.325.mat”).

El contenido de este tipo de archivos es simple, limitándose a albergar dos variables: “MATRIX_cab” y “MATRIX” y (ver figura A2.22, parte izquierda), en las que se almacenan, respectivamente, las longitudes de onda finalmente seleccionadas (dadas por PARAM_TRAT.lambdas2, ver apartado A2.1.3) y los

espectros correspondientes de las pesadas (de múltiples lotes si fuese el caso) de una única formulación de pienso (ver figura A2.22, parte derecha).

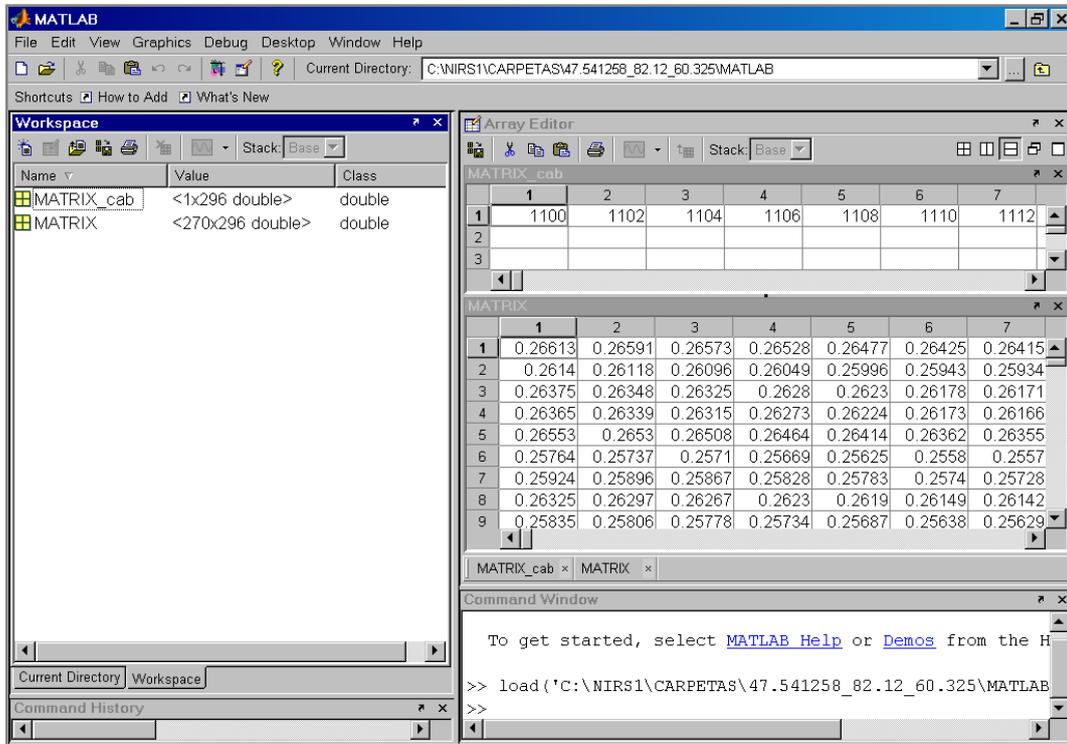


Figura A2.22: aspecto de un fichero que contiene una matriz de espectros

A2.9) Ficheros de modelos PCA (“*.mat”)

Estos archivos con formato MATLAB 7.0 (*.mat) son creados por NIVEL_OL1.m a través del subprograma NIVEL_2.m, y son guardados en el directorio “C:\NIRS1\CARPETAS**_**_**\MATLAB\” (el mismo empleado con los ficheros del apartado anterior). Su nomenclatura además es muy similar al de los ficheros de matrices de espectros, pues sólo se diferencian de aquellos en que a los de este apartado se les añade el prefijo “PCA_” para distinguirlos (siguiendo con un ejemplo continuación del anterior, el fichero del modelo PCA mostrado en la figura A2.23 tiene por nombre “PCA_47.541258_82.12_60.325.mat”).

El contenido de estos archivos se caracteriza por almacenar una estructura de datos, llamada MODELO_PCA, en la que se incluye información diversa sobre el modelo de componentes principales (PCA) que de forma automática crea el sistema a partir de los espectros capturados (en diferentes pesadas y lotes) para una determinada formulación de pienso. Esta estructura de datos está compuesta por 7 campos (MODELO_PCA.detail, MODELO_PCA.loads, MODELO_PCA.centro, MODELO_PCA.sigma, MODELO_PCA.T_lim, MODELO_PCA.Hglim y MODELO_PCA.Hvlim, ver figura A2.23, parte derecha) cuyo significado es explicado en lo que sigue.

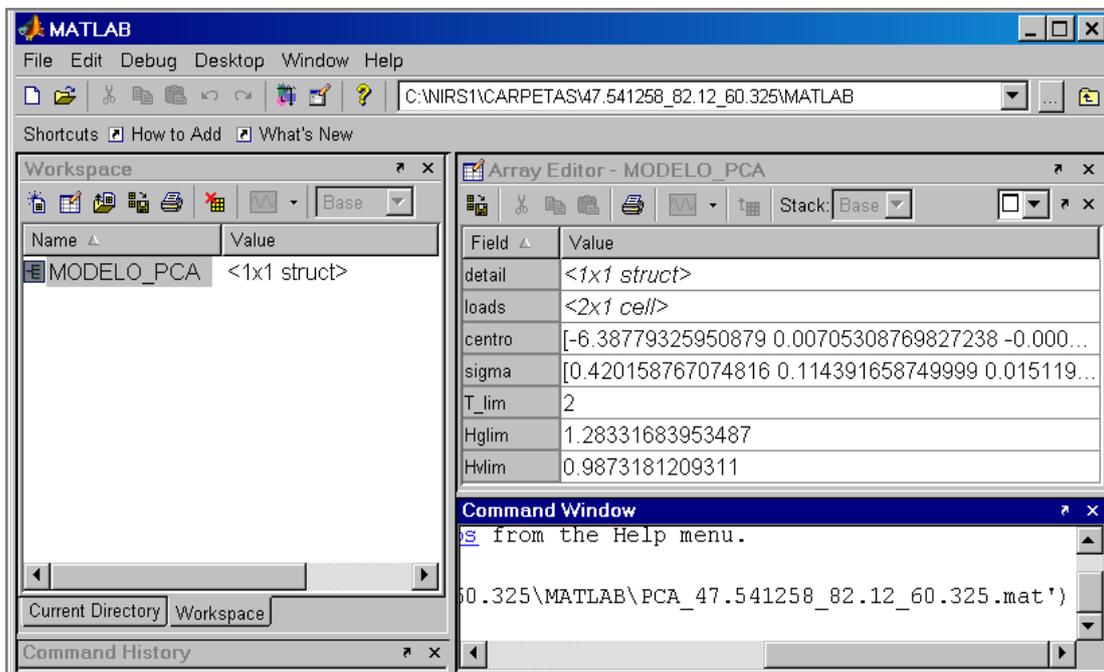


Figura A2.23: aspecto de un fichero que contiene una modelo PCA

A2.9.1) MODELO_PCA.detail

En este campo se incluye una matriz de datos llamada "ssq" en la que se incluye información relativa a los valores propios del modelo PCA construido. Tiene 4 columnas y un número de filas igual al número de componentes principales

elegidas para constituir el modelo PCA. Por orden, de izquierda a derecha (ver ejemplo en figura A2.24, parte inferior), cada columna de “ssq” indica respectivamente: el número de componente principal, el valor propio de cada componente, la varianza explicada por componente y la varianza acumulada.

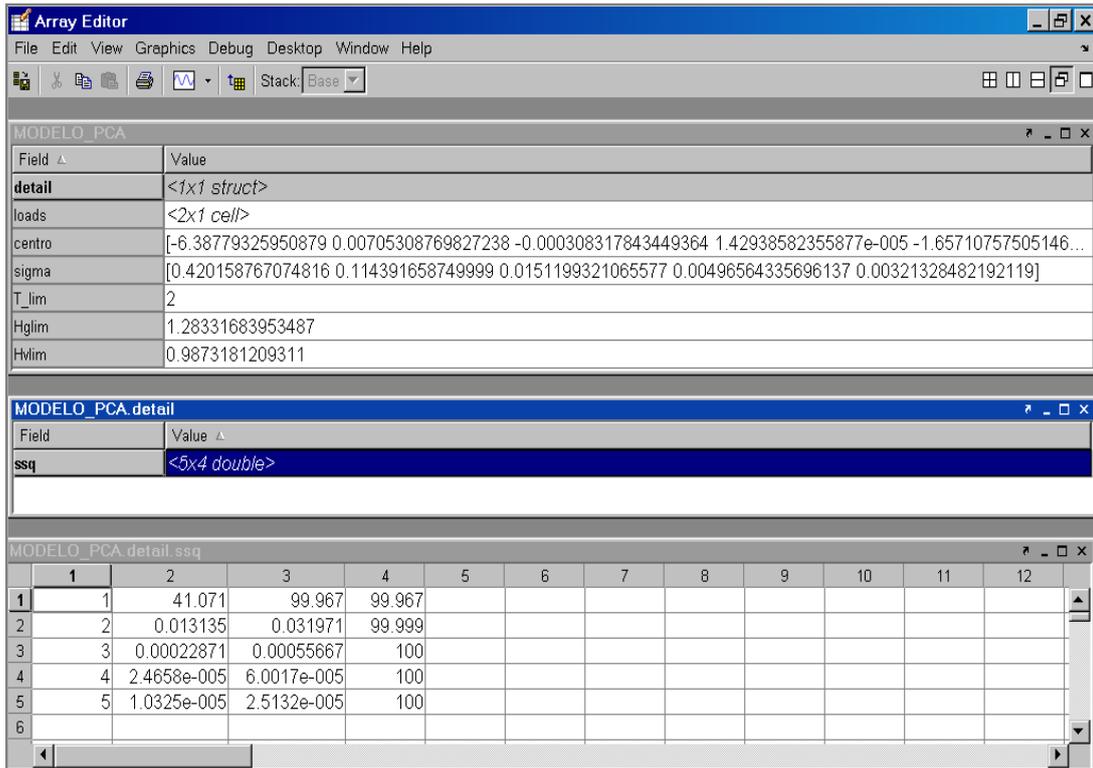


Figura A2.24: detalle de contenidos del campo MODELO_PCA.detail

A2.9.2) MODELO_PCA.loads

Este campo está constituido por una “cell array” compuesta por dos matrices. En la primera de ellas (ver como ejemplo la figura A2.25, parte inferior izquierda) se almacenan los “scores” (coordenadas de los espectros del modelo en el nuevo espacio de componentes principales), y en la segunda de estas matrices se alojan los “loadings” (vectores propios del modelo PCA, ver ejemplo de la figura A2.25, parte inferior derecha).

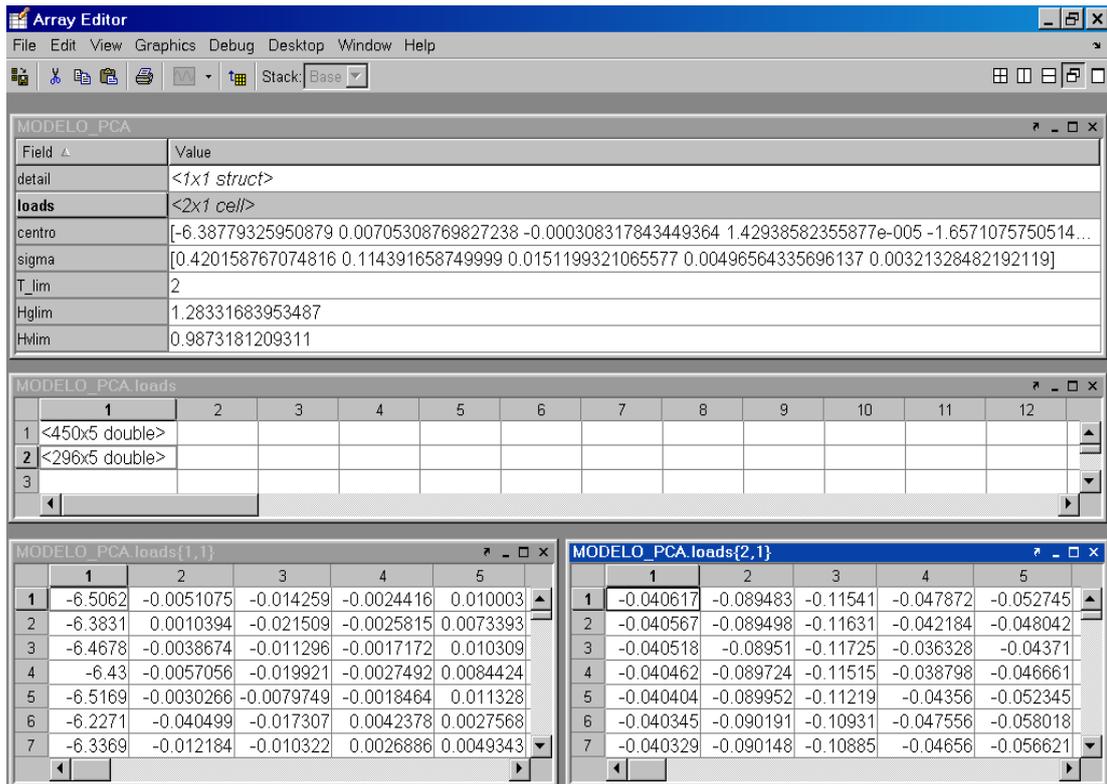


Figura A2.25: detalle de contenidos del campo MODELO_PCA.loads

A2.9.3) MODELO_PCA.centro y MODELO_PCA.sigma

Estos dos campos incluyen, respectivamente, la media de los “scores” del modelo (centro de la población) y la desviación típica de los mismos (ver figura A2.26, parte inferior).

A2.9.4) MODELO_PCA.T_lim, MODELO_PCA.Hglim y MODELO_PCA.Hvlim

Estos tres campos alojan, de forma respectiva, los valores límite asignados a los estadísticos T de Student, Hg (distancia de Mahalanobis al centro de la población de “scores”) y Hv (distancia de Mahalanobis entre “scores” vecinos). Como ejemplo, en la figura A2.26 (parte superior) se muestran los valores de estos campos para un modelo PCA concreto.

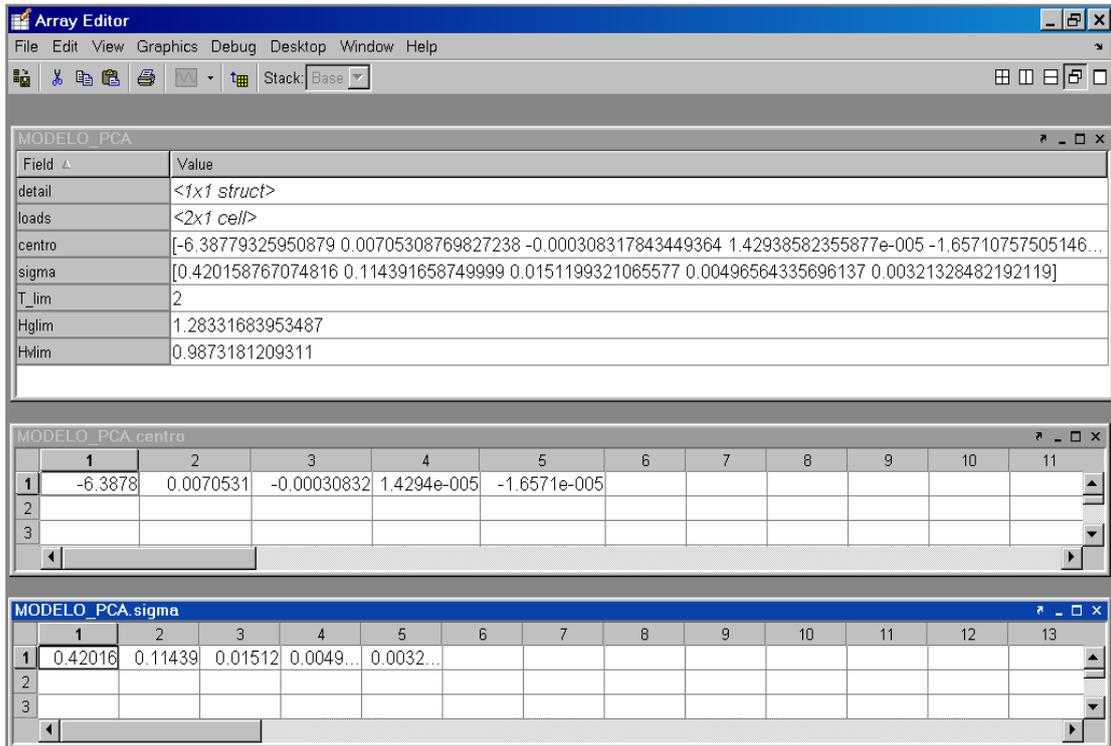


Figura A2.26: detalle de otros campos contenidos en MODELO_PCA

Anexo 3: Ficheros de almacenamiento ligados a “control_menu.m”

En este anexo se describe el contenido de los ficheros de almacenamiento gestionados directa o indirectamente (a través de algún subprograma) por el programa principal “control_menu.m”, encargado de producir y controlar una interfaz gráfica del sistema. De forma similar al anexo anterior, los ficheros mencionados serán mostrados por apartados siguiendo el orden de la figura que se adjunta a continuación (véase fundamentalmente la parte derecha).

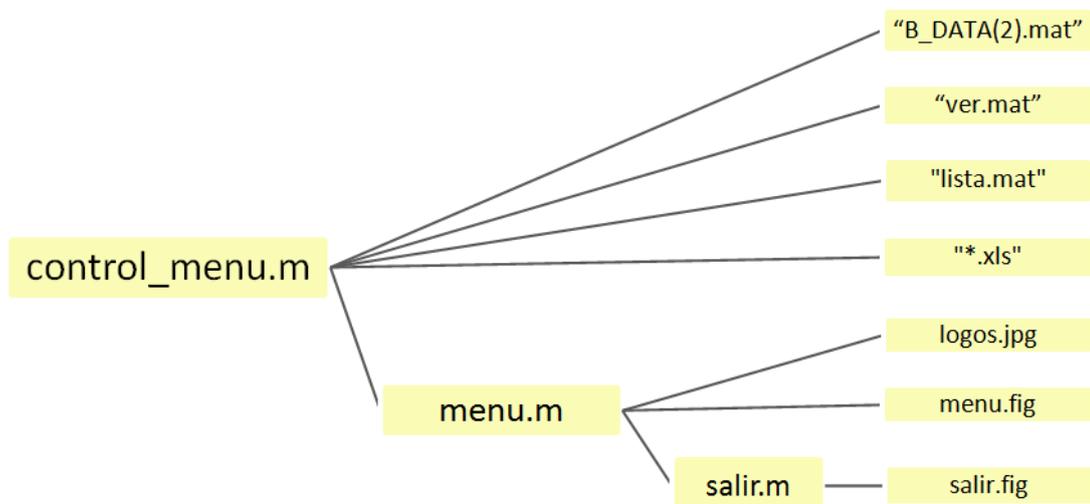


Figura A3.1: ficheros de almacenamiento relacionados con el programa “control_menu.m”

A3.1) Fichero “B_DATA(2).mat”

Este archivo tiene formato propio de MATLAB 7.0 (ver figura A3.2) y es cargado directamente por control_menu.m desde el directorio: “C:\CONTROL_NIR\”. Como en el caso de otros ficheros importantes, existe una

copia de reserva del mismo (B_DATA(2)_2.mat) que el sistema usará automáticamente, ante cualquier daño, para restaurar los valores iniciales de configuración.

La función de B_DATA(2).mat es la de aportar un espacio de memoria en el que se puedan almacenar ciertos parámetros de configuración que son básicos para el correcto funcionamiento de la interfaz gráfica del sistema. Estos parámetros se encuentran alojados en dos estructuras de datos cuyos nombres son (ver figura A3.2, parte izquierda): RUTA_SC y LIMITS. El contenido de estas estructuras se detalla en lo que sigue.

A3.1.1) RUTA_SC

Esta estructura de datos contiene 12 campos en los que se guardan algunas rutas útiles para el almacenamiento de otros archivos (ver figura A3.2, parte derecha). Estos campos y rutas son:

- RUTA_SC.D01: ruta del directorio en el que se almacena “control_menu.m” y todos los ficheros y carpetas gestionados por dicho programa. En la figura A3.2 se puede comprobar que RUTA_SC.D01 = 'C:\CONTROL_NIR\'.
- RUTA_SC.D02: ruta del directorio en el que se puede almacenar aquella información de interés referente a los controles de calidad realizados en la línea 1. Por defecto se establece que RUTA_SC.D02 = 'C:\CONTROL_NIR\LINEA1\'.
- RUTA_SC.D03: ruta homóloga a la anterior pero con utilidad para una segunda línea de control (línea 2). Por defecto se asume que RUTA_SC.D03 = 'C:\CONTROL_NIR\LINEA2\'.

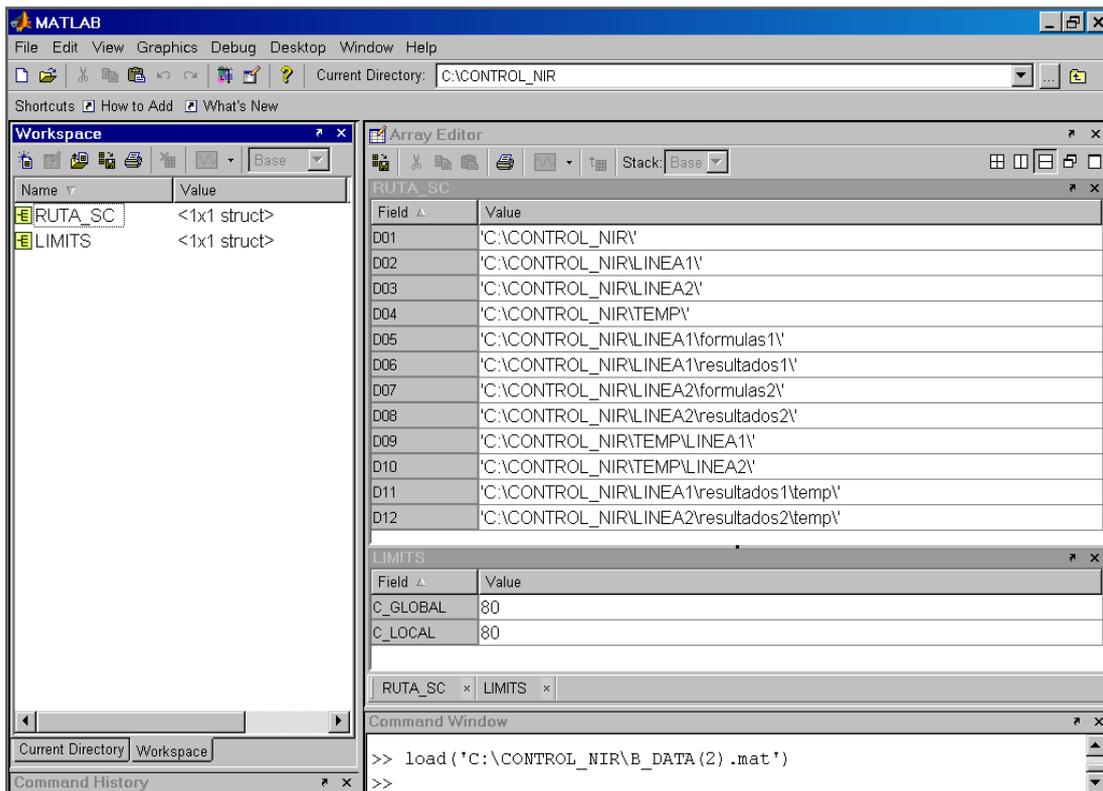


Figura A3.2: aspecto del contenido del fichero B_DATA(2).mat

- RUTA_SC.D04: ruta del directorio en el que se alojan los ficheros “ver.mat”, “ver_2.mat”, “lista.mat” y “lista_2.mat” (la utilidad de estos ficheros será explicada más adelante). Por defecto, se toma RUTA_SC.D04 = ‘C:\CONTROL_NIR\TEMP\’.
- RUTA_SC.D05: ruta del directorio en el que se pueden almacenar, si se desea en el futuro, los ficheros originales de formulación (con formato *.txt) empleados en la línea 1. Actualmente no está en uso para evitar redundancia con la información contenida en los ficheros *.xls de resultados. Por defecto, se asigna RUTA_SC.D05 = ‘C:\CONTROL_NIR\LINEA1\formulas1\’.
- RUTA_SC.D06: ruta del directorio en el que se almacenan globalmente los resultados de los controles de calidad llevados a cabo en la línea 1. Dicha

información está organizada por años, meses y días alojando las carpetas oportunas dentro del mismo. Por defecto, se asume que RUTA_SC.D06 = 'C:\CONTROL_NIR\LINEA1\resultados1\'.

- RUTA_SC.D07: ruta homóloga a la establecida en el campo RUTA_SC.D05 pero relativa a los ficheros originales de formulación empleados en la línea 2. Actualmente no está en uso. Por defecto se toma, no obstante, RUTA_SC.D07 = 'C:\CONTROL_NIR\LINEA2\formulas2\'.
- RUTA_SC.D08: ruta homóloga a la establecida en el campo RUTA_SC.D06 pero relativa a los controles que puedan hacerse en la línea 2. Actualmente no está en uso. Por defecto se asigna RUTA_SC.D08 = 'C:\CONTROL_NIR\LINEA2\resultados2\'.
- RUTA_SC.D09: ruta del directorio en el que se guardan temporalmente los archivos originales de formulación (*.txt) de la línea 1 suministrados por la sala de control. Por defecto, se establece que RUTA_SC.D09 = 'C:\CONTROL_NIR\TEMP\LINEA1\'.
- RUTA_SC.D10: ruta homóloga a la anterior pero relacionada con los archivos de formulación (*.txt) de la línea 2. Actualmente no está en uso. Por defecto, se asume que sea RUTA_SC.D10 = 'C:\CONTROL_NIR\TEMP\LINEA2\'.
- RUTA_SC.D11: ruta del directorio en el que se guardan temporalmente los archivos de resultados (*.xls) de la línea 1. Por defecto, se asigna RUTA_SC.D11 = 'C:\CONTROL_NIR\LINEA1\resultados1\temp\'.
- RUTA_SC.D12: ruta homóloga a RUTA_SC.D11 que está ligada a los archivos de resultados de la línea 2. Actualmente no está en uso. Por defecto, se toma RUTA_SC.D12 = 'C:\CONTROL_NIR\LINEA2\resultados2\temp\'.

A3.1.2) LIMITS

Esta estructura de datos es muy simple (ver figura A3.2, parte inferior derecha) pues sólo contiene 2 campos: LIMITS.C_GLOBAL y LIMITS.C_LOCAL. El valor y significado de esos campos es idéntico, respectivamente, al de los campos ENTRADA.C_GLOBAL_MIN y ENTRADA.C_LOCAL_MIN ya descritos en el apartado A2.1.1 del anexo 2. Su inclusión en el fichero B_DATA(2).mat evita posibles problemas de acceso al archivo BASIC_DATA_1.mat gestionado directamente por NIVEL_0L1.m.

A3.2) Fichero “ver.mat”

Este archivo tiene formato propio de MATLAB 7.0 (ver figura A3.3) y es cargado directamente por control_menu.m desde el directorio: “C:\CONTROL_NIR\TEMP\”. Como en el caso anterior, y ante posibles fallos, existe en dicho directorio una copia de reserva (ver_2.mat) que el sistema puede usar automáticamente para restaurar los valores iniciales de configuración.

La utilidad del archivo “ver.mat” reside en que en él se almacena una variable vectorial con tres elementos llamada “ver” (ver figura A3.3) cuya función (a modo de “interruptor”) es la de permitir la activación de todo, o parte, del sistema. El significado de cada elemento es el siguiente:

- Elemento ver(1,1): se encarga de activar las funciones (subprogramas) de control_menu.m relacionadas con el control de calidad realizado sobre la línea 1. Si ver(1,1) = 1, dichas funciones estarán activas. Si ver(1,1) = 0, las funciones sobre línea 1 estarán desactivadas (no se realiza control de calidad en la línea 1).
- Elemento ver(2,1): su significado es homólogo al anterior pero en relación con la línea 2: si ver(2,1) = 1, las funciones de control_menu.m relacionadas con la

línea 2 estarán activas. Si $\text{ver}(2,1) = 0$, estas funciones estarán desactivadas (no se realiza control de calidad en la línea 2).

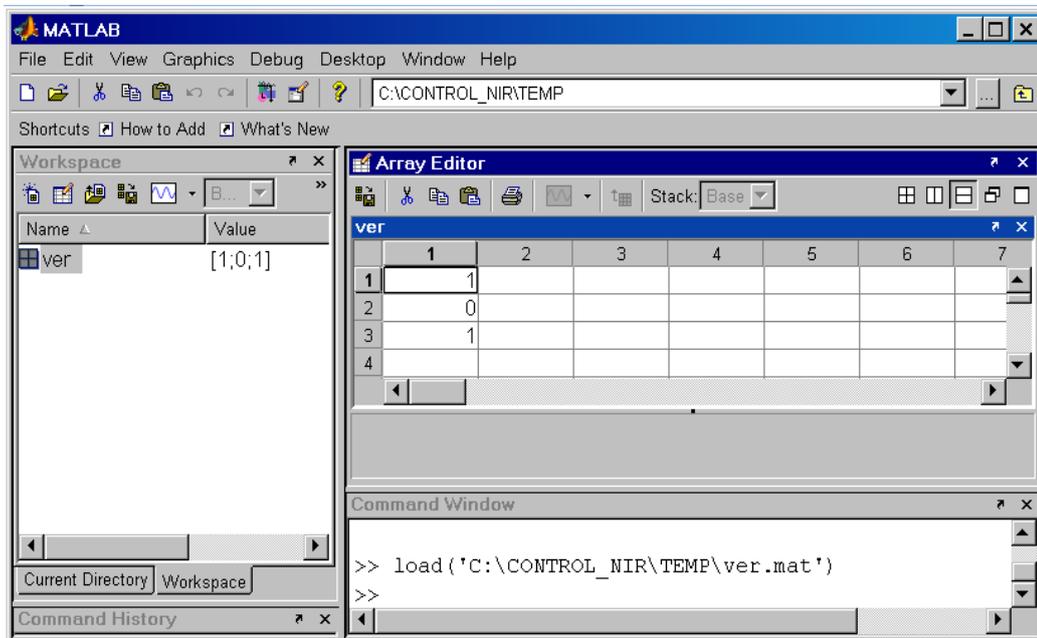


Figura A3.3: aspecto del contenido del fichero ver.mat

- Elemento $\text{ver}(3,1)$: se encarga de activar el funcionamiento general de la interfaz gráfica. Si $\text{ver}(3,1) = 1$, la interfaz gráfica estará operativa. Si $\text{ver}(3,1) = 0$, la interfaz no estará funcionando (el control de calidad estará desactivado en su totalidad).

A3.3) Fichero “lista.mat”

Este archivo tiene formato propio de MATLAB 7.0 (ver figura A3.4), y al igual que el anterior, es cargado directamente por `control_menu.m` desde el directorio “C:\CONTROL_NIR\TEMP\”, y tiene una copia de seguridad ante posibles fallos (`lista_2.mat`) para poder restaurar automáticamente los valores iniciales de configuración.

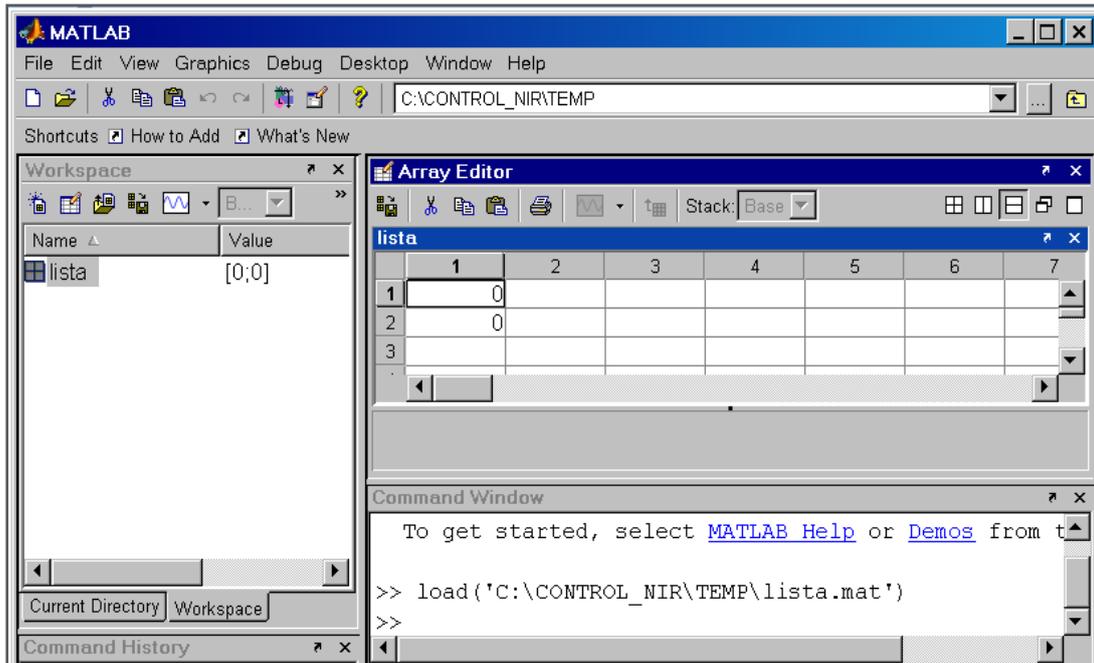


Figura A3.4: aspecto del contenido del fichero lista.mat

Su contenido es sencillo, pues en él sólo se almacena una variable vectorial con dos elementos llamada “lista”. El empleo de esta variable es útil para controlar los resultados estadísticos que son mostrados en pantalla cada momento. El significado de los elementos de esta variable es el siguiente:

- Elemento lista(1,1): se encarga de controlar la salida de resultados de la línea 1. Si lista(1,1) = 0, se muestran los resultados de la última pesada fabricada. Si lista(1,1) = 1, se mostrarán los resultados de aquella pesada que sea seleccionada en la lista de chequeo de la línea 1.
- Elemento lista(2,1): significado homólogo al anterior pero relativo a la línea 2: si lista(2,1) = 0, se mostrarán los resultados de la última pesada fabricada, y si lista(2,1) = 1, se mostrarán los resultados de la pesada seleccionada en la lista de chequeo de la línea 2.

A3.4) Ficheros “*.xls” gestionados por control_menu.m

Estos ficheros con formato de Microsoft Excel 97/2003 son en realidad los creados por NIVEL_0L1.m tal y como se indicó en el apartado A2.3 del anexo 2. Su nombre, estructura y contenido son los mismos que los descritos en el citado apartado (ver figura A3.5 ó A2.11). El único hecho destacable que puede mencionarse aquí es que el programa control_menu.m captura estos ficheros de su directorio origen (“C:\NIRS1\CARPETAS**_ _ _*\OTROS\Resultados\”) y los pone a disposición de la interfaz gráfica (para que puedan ser mostrados en caso de que sean seleccionados desde la lista de chequeo). Su nueva ruta de almacenamiento es:

	A	B	C
1	INGREDIENTE	CÓDIGO	% - TEÓRICO
2	0	350110	1.43
3	0	1020101	39.82
4	0	1020102	11.84
5	0	1020104	10.21
6	0	1020105	20.42

	A	B	C
1	PARÁMETRO	% - TEÓRICO	% - NIR
2	0	0	0
3	0	0	0
4	0	0	0
5	0	0	0
6	0	0	0

	A	B	C
1	CALIDAD	ACEPTABLE	LÍMITES
2	C_GLOBAL	91%	SUPERAR 80%
3	C_LOCAL	100%	SUPERAR 80%
4	H_GLOBAL	0.74	NO SUPERAR 1.28

	A	B	C	D	E
1	Orden Prod SIGES: 504/10				
2	Lote: 11578				
3	Producto Codigo: 4300027				
4	Producto Nombre: C - 9 GRA. GRANEL COMPLEM. I				
5	LINEA_1				

Figura A3.5: aspecto de los ficheros *.xls gestionados por control_menu.m

- Para la línea 1:

“C:\CONTROL_NIR\LINEA1\resultados1**año-mes****año-mes-día**\”.

- Para la línea 2 (en caso de estar operativa en el futuro):

“C:\CONTROL_NIR\LINEA2\resultados2**año-mes****año-mes-día**\”.

Los símbolos ****año-mes**** y ****año-mes-día**** sirven para indicar, respectivamente, el nombre genérico de una carpeta ligada a un mes y año determinado (por ejemplo 2010-01), y a un año, mes y día dado (2010-01-01).

A3.5) Ficheros de almacenamiento gráfico

Para que el subprograma “menu.m” (ver apartado A5.1.1 del anexo 5) pueda ejecutarse de forma satisfactoria, es necesario que los ficheros “logos.jpg” y “menu.fig” estén a su disposición. En ambos ficheros se almacena información de tipo gráfico que es útil para desplegar la interfaz de apoyo que sirve para controlar el sistema de control. En concreto, el fichero “logos.jpg” sirve para incluir un logotipo (ver figura A3.6) en la interfaz gráfica, y el fichero “menu.fig” (formato propio de MATLAB creado con su aplicación GUI) contiene la imagen de referencia de la interfaz gráfica (ver figura A3.7).

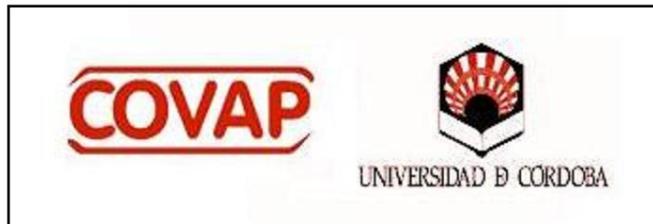


Figura A3.6: aspecto de la imagen contenida en el fichero “logos.jpg”

De forma similar, el subprograma “salir.m” (ver apartado A5.1.1.1 del anexo 5) requiere para su ejecución del fichero “salir.fig”. La información gráfica contenida en ese fichero *.fig queda mostrada en la figura A3.8.

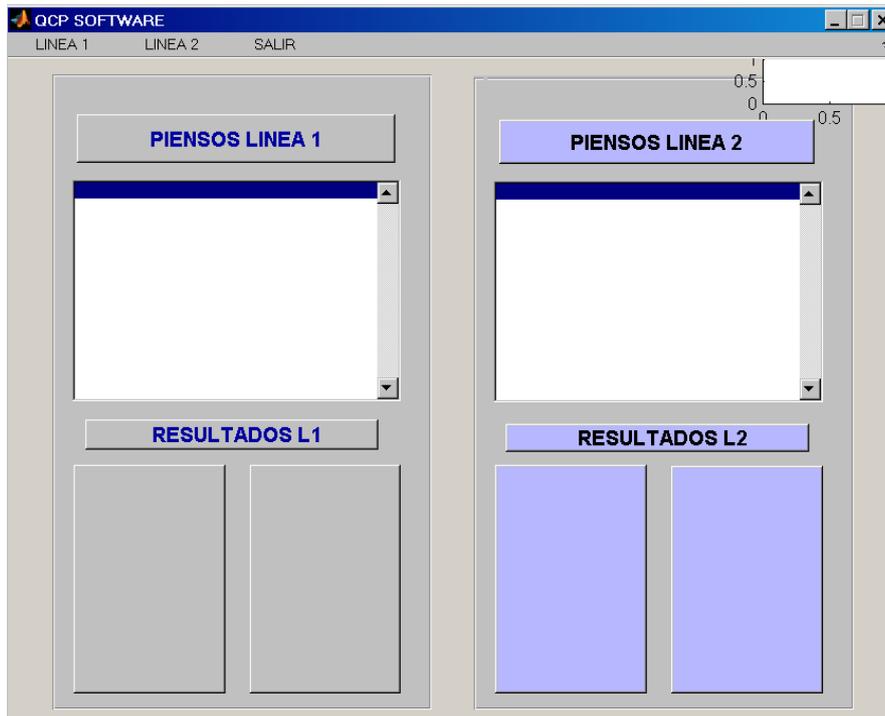


Figura A3.7: aspecto de la imagen contenida en el fichero "menu.fig"

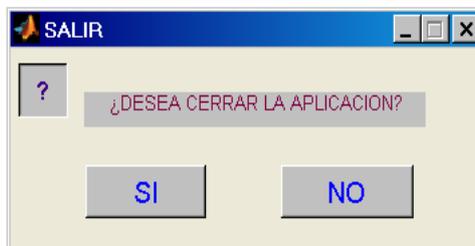


Figura A3.8: aspecto de la imagen contenida en el fichero "salir.fig"

Anexo 4: Relación de subprogramas ligados a “NIVEL_0L1.m”

No se incluye el contenido de este anexo para evitar cualquier conflicto de intereses.

Anexo 5: Relación de subprogramas ligados a “control_menu.m”

No se incluye el contenido de este anexo para evitar cualquier conflicto de intereses.

Anexo 6: Configuración del programa Cora

En el presente anexo se presenta la configuración básica de funcionamiento que debe tener el espectrofotómetro empleado para que pueda ser compatible con los programas “NIVEL_0L1.m” y “control_menu.m” desarrollados en este Trabajo. Para ello, se debe acceder al software propio del fabricante que acompaña a este equipo (CORA de Carl Zeiss) y editar algunos de los parámetros de control que trae por defecto.

En lo que sigue, se muestran algunos pasos que pueden ayudar a realizar esta tarea. Para tener un mayor conocimiento sobre el funcionamiento del software CORA, se recomienda consultar la documentación que acompaña a este programa (Carl Zeiss, 2004).

A6.1) Configuración de directorios y aspecto inicial

El programa ejecutable del software del espectrofotómetro que gestiona inicialmente la captura de espectros se denomina “cora.exe”, y debe estar instalado en la carpeta “C:\CORA\” (directorio normalmente recomendado por el fabricante del instrumento).

Si hacemos doble-clic sobre este ejecutable (o sobre un acceso directo del mismo que tengamos disponible), se abrirá por completo el programa Cora y podremos acceder a la opción “Setup/Setup Center” del menú existente en la parte superior de su interfaz gráfica (ver figura A6.1). Hecho esto, veremos que se despliega un panel de texto con varias opciones (ver figura A6.2).

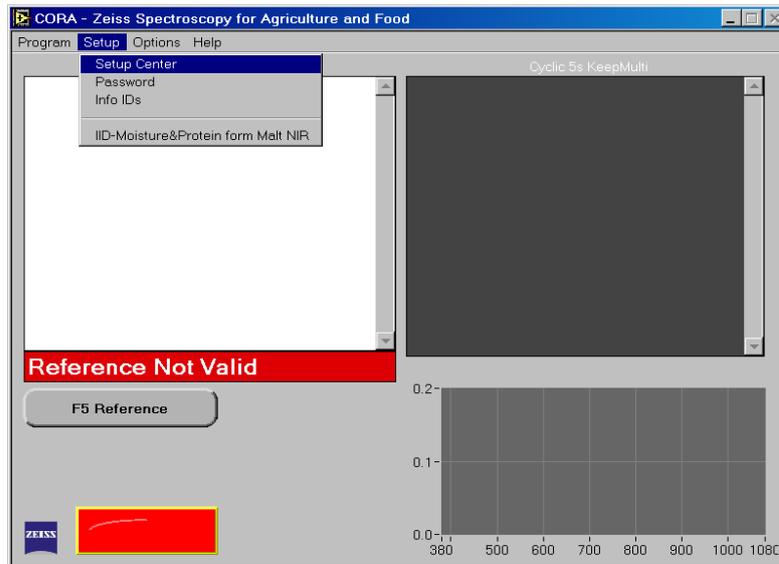


Figura A6.1: acceso a la opción “Setup/Setup Center” de Cora

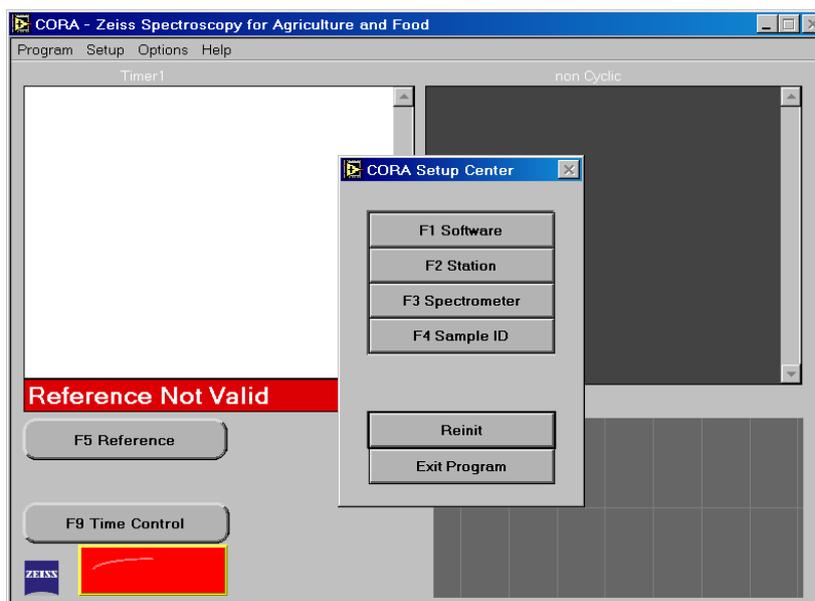


Figura A6.2: despliegue del panel de configuración de Cora

Elegimos la primera opción (“F1 Software”) y saldrá una pantalla como la mostrada en la figura A6.3. Entonces, procedemos a cambiar las casillas ligadas a “Spectral Data”, “Required Memory” y “Sample ID dialog at start”. El contenido de esos campos debe ser como el mostrado en la figura A6.4. Hecho esto, pulsamos el botón “OK” y ya tenemos configurado este primer apartado.

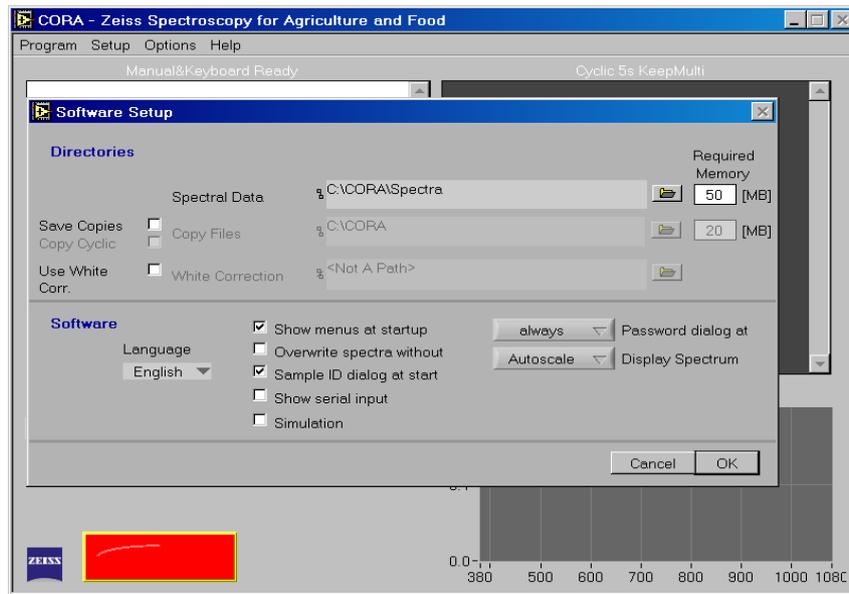


Figura A6.3: despliegue de la opción "F1 Software"

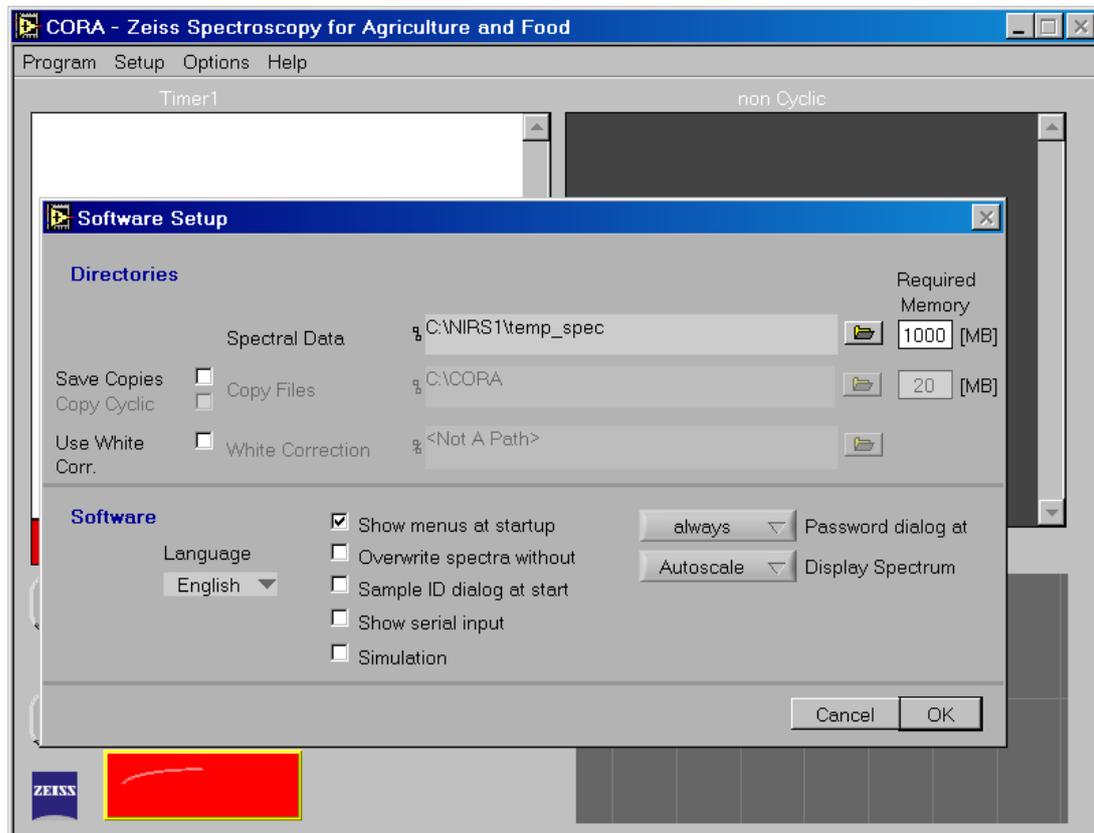


Figura A6.4: contenido editado de la opción "F1 Software"

A6.2) Configuración del modo de captura

Volvemos de nuevo al panel de texto que se mostraba en la figura A6.2 y seleccionamos la opción “F2 Station”. Tras esto, podrá verse en pantalla una ventana como la presentada en la figura A6.5.

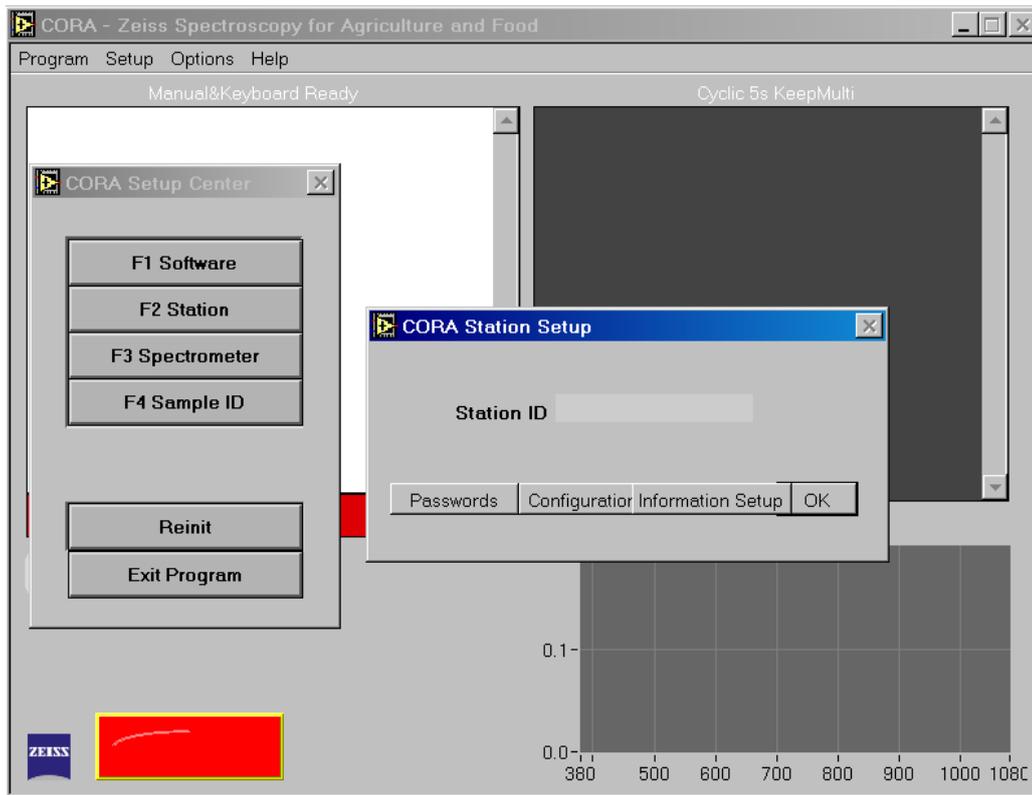


Figura A6.5: pantalla de acceso a la opción “F2 Station”

Elegimos la pestaña “Configuration” (situada entre las opciones “Passwords” e “Information Setup”) y automáticamente se desplegará una ventana como la mostrada en la figura A6.6, en la que se disponen diversos ficheros a seleccionar. Tomamos el nombrado como “Timer1.ccf” (opción que implica la captura automática de espectros a intervalos) y hacemos clic en “abrir”. Hecho esto, el presente apartado quedará completado y volveremos de nuevo al panel de la figura A6.2.

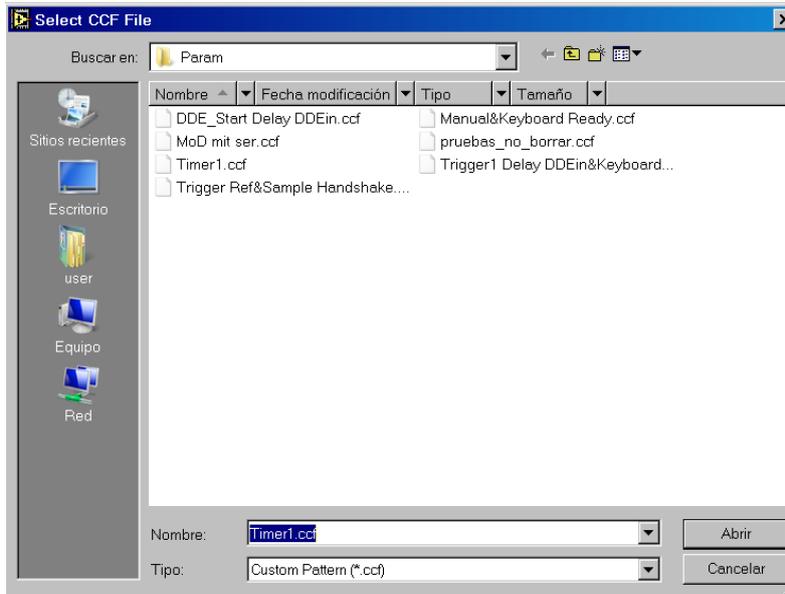


Figura A6.6: configuración del modo de captura

A6.3) Configuración de los parámetros de captura

Seleccionamos la opción “F3 Spectrometer” (ver figura A6.2) y aparecerá en pantalla una ventana como la desplegada en la figura A6.7. Veremos que se muestran los nombres de diversos ficheros. Elegimos el que tiene por nombre “Cyclic 5s.cms” y pulsamos más abajo en “abrir”.

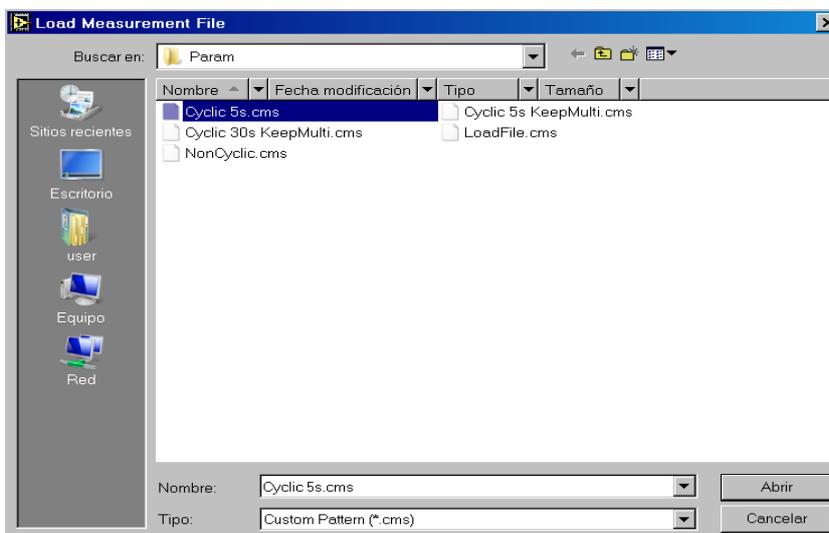


Figura A6.7: pantalla de acceso para configurar los parámetros de captura

Tras esta operación saldrá un panel de texto con diversas casillas (ver figura A6.8). Debemos modificarlas prácticamente todas, quedando al final tal y como se muestran en la figura A6.9 (el intervalo de tiempo mostrado en la parte inferior derecha puede ser mayor de 100 minutos si así se desea).

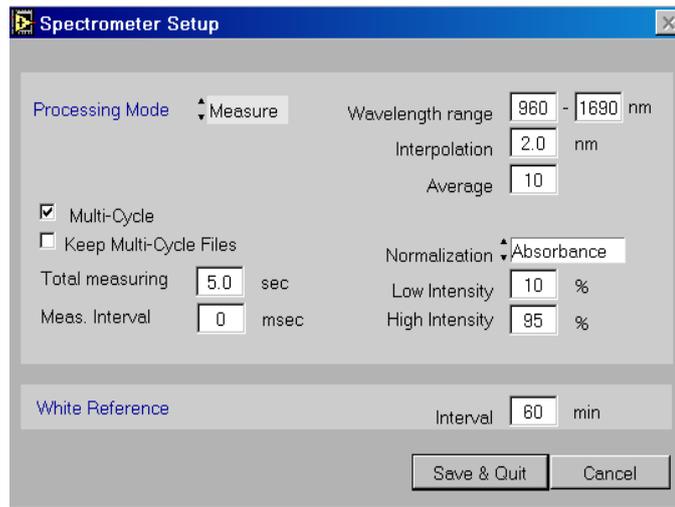


Figura A6.8: pantalla de configuración de los parámetros de captura

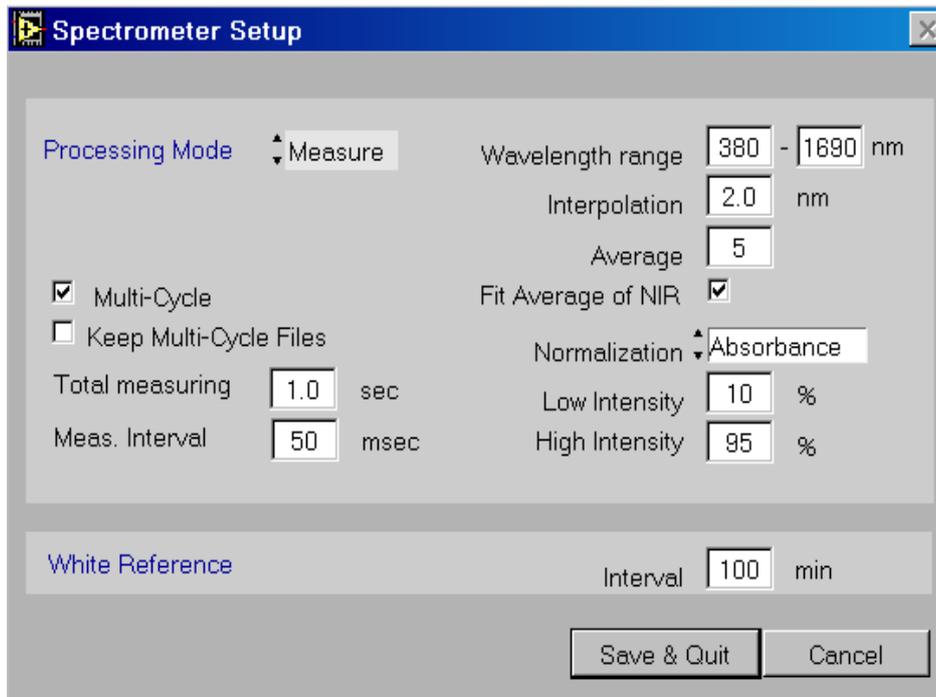


Figura A6.9: valores adecuados de los parámetros de captura

Hecho esto, pulsamos “Save&Quit” (parte inferior de la figura A6.9) y nos saldrá una ventana para que guardemos los parámetros antes definidos en un fichero nuevo (ver figura A6.10). Elegimos el nombre que creamos más conveniente (por ejemplo, “Cyclic 1s.cms”, tal y como se indica en la figura A6.10), y cerramos esta ventana pulsando “guardar”. Hecho esto, la configuración de los parámetros de captura estará completada.

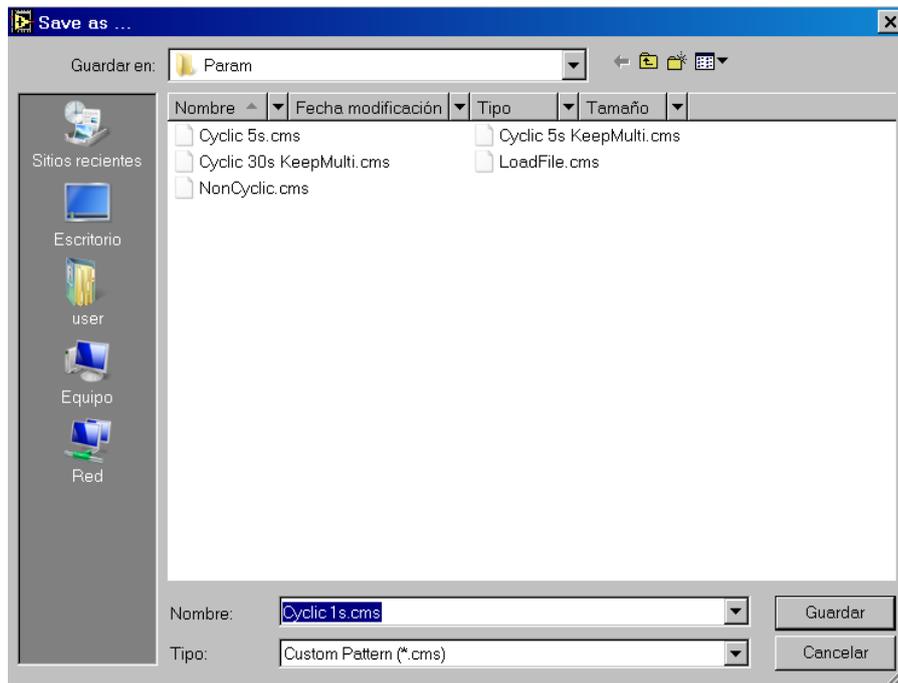


Figura A6.10: almacenamiento de los parámetros de captura redefinidos

A6.4) Configuración de los nombres de los ficheros *.SPC

Volviendo al panel de texto de la figura A6.2, seleccionamos en esta ocasión la opción “F4 Sample ID” y se mostrará en pantalla una ventana como la presentada en la figura A6.11. Se trata entonces de ir cambiando las diferentes casillas de esa ventana para que al final tengan los valores correspondientes a los fijados en la figura A6.12. Terminada esa tarea, pulsamos sobre el botón “OK” y este último apartado de configuración habrá sido completado.

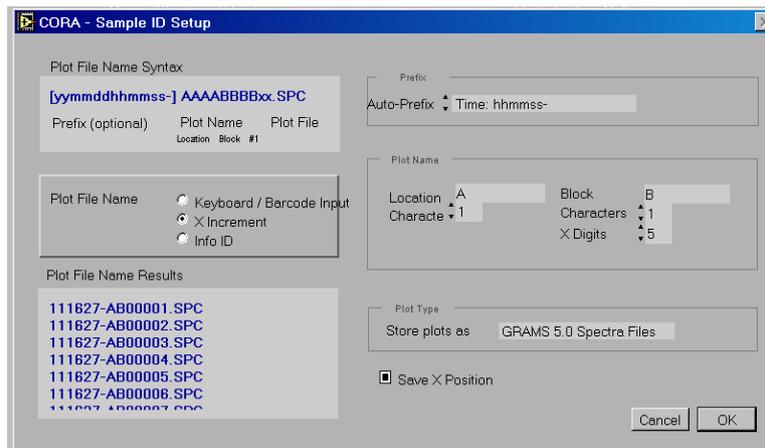


Figura A6.11: ventana para configurar los nombres de los ficheros *.SPC

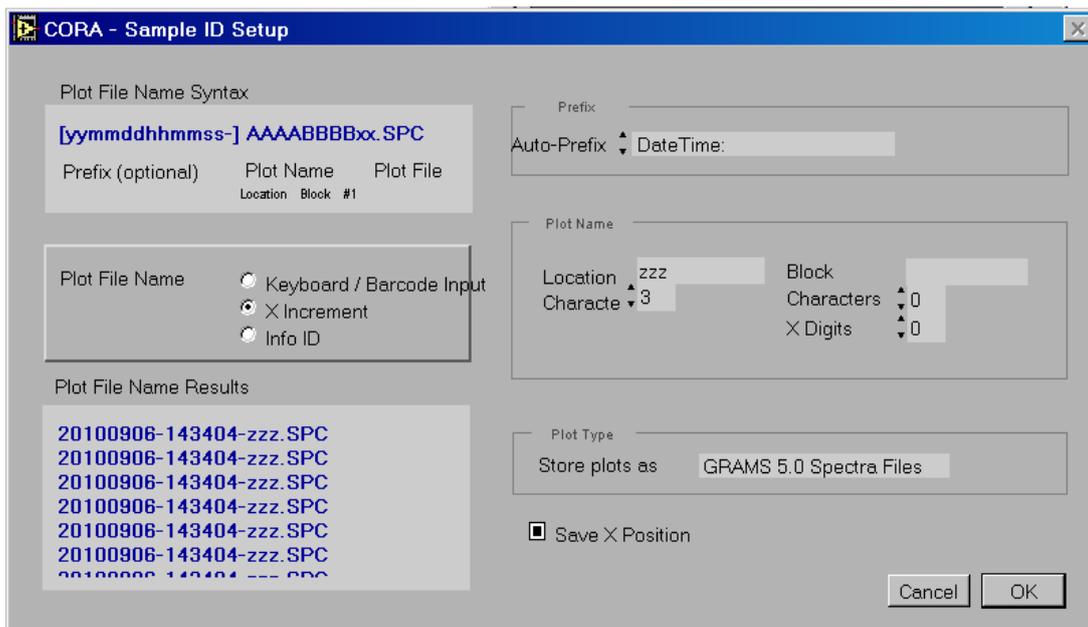


Figura A6.12: opciones correctas de configuración para nombrar los ficheros *.SPC

Anexo 7: Bibliografía

Alamar, M.C., Bobelym, E., Lammertyn, J., Nicolaï, B.M., Moltó, E. (2007). Calibration transfer between NIR diode array and FT-NIR spectrophotometers for measuring the soluble solids contents of apple. *Postharvest Biology and Technology*, 45, 38-45.

Burns, D.A. y Ciurczak E.W. (2007). *Handbook of near-Infrared Analysis*, 3ª Edición. CRC Press, Taylor & Francis Group. New York.

Carl Zeiss (2004). CORA, Software Specification & Manual (Release 2.xx for Windows 2000 / XP). Carl Zeiss Jena GmbH -Spectral Sensors Dept. Germany.

Carl Zeiss (2011). Optical Sensor Systems: Corona Plus 45. Recurso en web (acceso diciembre 2011): <http://www.zeiss.com/C12567BB00549F37/Contents-Frame/B7624E2D28A902FCC125782C005986DD>.

Cleve, E., Bach, E., Schollmeyer. (2000). Using chemometric methods and NIR spectrophotometry in the textile industry. *Analytica Chimica Acta*, 420, 163-167.

COVAP (2006). Automatización del control de calidad en fabricación de mezclas y piensos en la Cooperativa COVAP mediante tecnología NIR. Departamento de Calidad y Departamento de I+D+I. Documento no publicado.

Fernández-Ahumada, E., Guerrero-Ginel, J.E., Pérez-Marín, D. and Garrido-Varo, A. (2008). Near infrared spectroscopy for control of the compound-feed manufacturing process: mixing stage. *J. Near Infrared Spectrosc.* Vol (16), 3: 285 – 290.

Fontán, J.M., López-Bellido, L., García-Olmo, J. and López-Bellido, R.J. (2011). Soil carbon determination in a Mediterranean vertisol by visible and near infrared reflectance spectroscopy. *J. Near Infrared Spectrosc.* Vol (19), 4: 253–263.

GIC - Galactic Industries Corporation (1997). Galactic Universal Data Format Specification. Recurso en web (acceso diciembre 2011):

http://www.adeptsience.co.uk/products/lab/grams32/instruments/gspc_udf.pdf

He, Y., Huang, M., García, A., Hernández, A., Song, H. (2007). Prediction of soil macronutrients content using near-infrared spectroscopy. *Computers and Electronics in Agriculture*, 58, 144-153.

Mathworks (2011). Desktop Tools and Development Environment, MATLAB Version 7 (R14). The MathWorks, Inc. Natick (USA). Recurso en web (acceso diciembre 2011): <http://www.mathworks.es/help/techdoc/rn/f3-998197.html>

Næs, T., Isaksson, T., Fearn, T. and Davies, T. (2007). A user friendly guide to Multivariate Calibration and Classification, NIR Publications, Chichester, UK.

Nicolai, B.M., Theron, K.I., Lammertyn, J. (2007). Kernel PLS regression on wavelet transformed NIR spectra for prediction of sugar content of apple. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 85, 243-252.

Paul, C. (2004). Shaping the future use of NIR sensors on agricultural harvester. In: *Embedded Near Infrared Spectroscopy, NIR goes to the fields*. 2nd International Conference on Embedded NIR. CRA-W, Gembloux. Belgium.

Pereira, C.F., Pimentel, M.F., Galvão, R.K.H., Honorato, F.A., Stragevitch, L., Martins, M. N. (2008). A comparative study of calibration transfer methods for determination of gasoline quality parameters in three different near infrared spectrometers. *Analytica Chimica Acta*, 611, 41-47.

Pérez-Marín, D., Garrido-Varo, A., Guerrero-Ginel, J.E. and Gómez-Cabrera, A. (2004). Near-infrared reflectance spectroscopy (NIRS) for the mandatory labelling of compound feedingstuffs: chemical composition and open-declaration. *Anim. Feed Scienc. Techn.* 116, 333-349.

Roberts, C.A., Workman, J. y Reeves III, J.B. (2004). Near-Infrared Spectroscopy in Agriculture. ASA, CSSA and SSSA, Inc., Madison, Wisconsin, USA.

Roggo, Y., Chalus, P., Maurer, L., Lema-Martinez, C., Edmond, A., Jent, N. (2007). A review of near infrared spectroscopy and chemometrics in pharmaceutical technologies. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 44, 683-700.

Saeys, W., Mouazen, A. M., Ramon, H. (2005). Potential for on-site and on-line analysis of hog manure using visual and near-infrared reflectance spectroscopy. *2ECPLF, Uppsala, Sweden - Precision Livestock Farming '05 (Ed. S. Cox)*, 131-138. Recurso en web (acceso diciembre 2011):

http://www.biw.kuleuven.be/ae/amc/staff/wouters/wouter_files/ECPLF_Uppsala_2005.PDF .

Saeys W. (2006). Technical Tools for the Optimal Use of Animal Manure as a Fertiliser: On-line composition measurement and manure injection control. Tesis Doctoral. Recurso en web (acceso diciembre 2011):

https://lirias.kuleuven.be/bitstream/1979/288/5/Doctoraatsproefschrift710_Wouter_Saeys.pdf

Vallesquino-Laguna, P., Fearn, T., Garrido-Varo, A., Fernández-Ahumada, E., Pérez-Marín, D., Guerrero-Ginel, J., Gómez-Cabrera, A. (2010). How often do references need to be measured when using a near infrared diode array spectrometer. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, vol. (18), 1: 79 – 85.

Vallesquino-Laguna, P. (2010). Diseño y Programación de un Software Experto Aplicable al Control de Calidad “NIRS Online” en la Fábrica de Piensos de la Cooperativa COVAP. Trabajo Profesional Fin de Master - Máster Universitario de Proyectos y Gestión de Plantas Agroindustriales. IDEP - Universidad de Córdoba. Córdoba (España).