

Título de la revisión sistemática**CUANTIFICACIÓN Y CUALIFICACIÓN DE CAFÉ POR ESPECTROSCOPIA INFRARROJO CERCANO (NIRS)****Datos de la propuesta**

Grupo de investigación	Electroquímica y Medio Ambiente (GIEMA)
Línea de investigación	Alimentos y fármacos.

Estudiante (s)

Nombre:	Danna Gabriela Reina Villegas
Identificación	1006170436
Correo:	Danna.reina00@usc.edu.co
Teléfono:	3017676747

Nombre:	
Identificación	
Correo:	
Teléfono:	

Director

Nombre:	Sandra Patricia Castro Narvárez
Identificación	66828612
Correo:	Sandracastr00@usc.edu.co
Teléfono:	3013268627

Codirector

Nombre:	
Identificación	
Correo:	
Teléfono:	

CUANTIFICACIÓN Y CUALIFICACIÓN DE CAFÉ POR ESPECTROSCOPIA INFRARROJO CERCANO (NIRS).

Danna Gabriela Reina Villegas

Trabajo de grado presentada(o) como requisito parcial para optar al título de:
Química

Directora:
Sandra Patricia Castro Narváez

Línea de Investigación:
Alimentos y Farmacos

Grupo de Investigación en Electroquímica y Medio Ambiente

Universidad Santiago de Cali
Facultad de Ciencias Básicas,
Programa de química
Cali, Colombia
2024

CUANTIFICACIÓN Y CUALIFICACIÓN DE CAFÉ POR ESPECTROSCOPIA INFRARROJO CERCANO (NIRS)

Danna Gabriela Reina Villegas
Grupo Investigación electroquímica y Medio Ambiente, Facultad de Ciencias
Básicas, Universidad Santiago de Cali.
Danna.reina00@usc.edu.co.

Resumen

El café es un producto alimenticio de alto consumo, que conlleva a la garantía de su calidad y autenticación. En este documento se incluye la revisión bibliográfica de estudios entre 2017-2024, de las aplicaciones, ventajas y limitaciones de NIRS en la industria cafetera. Los resultados establecen que la NIRS puede identificar y cuantificar compuestos como la cafeína, trigonelina, ácidos clorogénicos, lixiviación de potasio, humedad, conductividad, entre otros, que establecen propiedades sensoriales del café. Además, se ha demostrado su utilidad en la detección de adulterantes y granos defectuosos, lo que contribuye a asegurar la calidad del producto final. Los resultados indican que esta técnica no solo mejora la eficiencia operativa, sino que también permite un control de calidad más riguroso, facilitando la diferenciación entre variedades de café, como Arábica y Robusta asegurando la autenticidad del producto.

Palabras Clave: café, granos, Nirs, adulteración, espectroscopia, predicción, tueste.

Abstract

Coffee is a food product of high consumption, which leads to the assurance of its quality and authentication. This paper includes the literature review of studies between 2017-2024 of the applications, advantages and limitations of NIRS in the coffee industry. The results establish that NIRS can identify and quantify compounds such as caffeine, trigonelline, chlorogenic acids, potassium leaching, humidity, conductivity, among others, which establish sensory properties of coffee. In addition, its usefulness has been demonstrated in the detection of adulterants and defective beans, which contributes to assuring the quality of the final product. The results indicate that this technique not only improves operational efficiency, but also allows a more rigorous quality control, facilitating the differentiation between varieties of coffee, such as Arabica and Robusta, assuring the authenticity of the product.

Key Word: coffee, beans, NIRS (Near-Infrared Spectroscopy), adulteration, prediction, roasting.

1 Introducción

Colombia ha logrado establecerse como uno de los principales productores de café del mundo. El café colombiano sigue conquistando a miles de paladares y olfatos alrededor del mundo gracias a su sabor, color e incluso olor. Las exportaciones en abril de 2024 se ubicaron en 792 mil sacos de 60kg por un valor de 220 millones de dólares, siendo el café verde excelso como el principal producto de exportación con un 81,2% del volumen total. Sin embargo, viene ganando terreno las exportaciones de cafés industrializados (8,0%) en forma de extracto, soluble, tostado. (Federación Nacional de Cafeteros, 2024).

La diferenciación de las cualidades de los diferentes tipos de café está asociada con las características químicas que le componen incidiendo en el sabor y el precio (Benitez, et al, 2019). Uno de los elementos que se controla cuando se almacena y distribuye café es el contenido de agua, que en grano verde debe ser inferior al 12,5%. (Nakilcioğlu et al, 2019). Así mismo, la determinación de los compuestos orgánicos tales como contenido de cafeína, lípidos, grasas, entre otros.

El análisis químico del café suele ser destructiva, entre ellas se incluye las técnicas cromatográficas (Amalia et al, 2021), fisicoquímicas (Cortez-Macias, eta al, 2022), por espectroscopia de absorción atómica (Ercan, et al, 2021), entre otras. Además, son técnicas que requieren largos tiempos de análisis, suelen ser costosas y poco eco amigables. Sin embargo, la espectroscopia de Infrarrojo cercano (NIRS) es un método no destructivo y económico que se ha posicionado por permitir analizar el contenido del café en poco tiempo y sin adición de productos químicos. La composición química de los materiales orgánicos se puede medir utilizando longitudes de onda NIR de 1000-2500nm, que contienen estructuras de información más complejas debido al patrón de combinación de enlaces químicos (Beć et al, 2022). La NIRS se ha utilizado de manera no destructiva para determinar los contenidos químicos, como cafeína (Nóbrega et al 2023), lípidos y proteínas (Zhu et al, 2021), contenido de agua, lípidos (Adrian et al, 2017), sacarosa (Caparaso, et al, 2018), trigonelina, ácido clorogénico (Budiastra et al, 2020), entre otros, en los granos de café.

La rapidez de análisis de NIRS permite hacer seguimientos en tiempo real y un flujo de trabajo continuo en la cadena de producción, lo cual es crucial para mantener la eficiencia operativa y tomar decisiones basadas en datos precisos. (Grassi, et al, 2023). Así mismo, el análisis NIRS de diferenciación fisicoquímica permite realizar geolocalización de los granos (Giraud et al, 2019).

Los modelos calibrados y validados de NIRS ofrecen lecturas de humedad con alta exactitud y mínima variabilidad, lo cual es esencial para asegurar la calidad del café. La principal ventaja que NIRS es ser un método no destructivo, lo que significa que los

granos de café no se dañan durante el análisis, permitiendo su uso posterior en el proceso de producción o para otros análisis. Esto también reduce las pérdidas de producto durante el control de calidad. (Yuwita et al., 2023).

En los últimos años, el aumento del consumo de bebidas de café ha estimulado una mejora en la calidad de los productos del café. Sin embargo, las características físicas del café pueden manipularse con ingredientes físicamente similares después de las etapas de tostado y molido (Nuñez et al, 2021). La capacidad de análisis multicomponente y la adaptabilidad de NIRS para diferentes tipos de granos y etapas de procesamiento hacen que esta tecnología cumpla con los estándares internacionales de calidad de manera más eficiente y fiable (Boadu, et al, 2023). En conjunto, estas ventajas hacen de NIRS una alternativa superior y preferida para la cualificación y cuantificación de parámetros en los granos de café.

Esta recopilación de información asociada al análisis NIR en café centró sus expectativas en la cualificación y cuantificación de parámetros fisicoquímicos asociados con el control de calidad tanto en la siembra como en el procesamiento del grado. Se hace énfasis en el análisis de las ventajas, limitaciones y oportunidades de la espectroscopía de infrarrojo cercano (NIRS) en la determinación de parámetros fisicoquímicos, criterios de autenticación y calidad en diferentes variedades de café.

2 Metodología

2.1 Búsqueda bibliográfica

Se llevo a cabo una búsqueda bibliográfica en bases de datos científicas como ScienceDirect, Google Scholar y Researchgate, seleccionando artículos de investigación publicados entre los años 2017 y 2024. Se emplearon palabras clave como “NIRS”, “coffee”, “roasting”, “analysis”, “beans”, “calibration” y “adulteration” para identificar estudios relevantes. La búsqueda bibliográfica se centró en artículos originales publicados (en inglés), esto con el objetivo de asegurar la revisión de investigaciones recientes y relevantes. Se usaron conectores booleanos de AND y OR entre las palabras claves

Las búsquedas se realizaron en títulos, resúmenes y palabras claves de los artículos para identificar estudios que dieran respuesta a las preguntas de investigación planteadas. Estas búsquedas se centraron especialmente en artículos que evaluaran la precisión, rapidez y sostenibilidad de NIRS, de igual manera. Que presentaran comparaciones entre NIRS y métodos fisicoquímicos tradicionales.

Al obtener los artículos más relevantes, se organizó la información en una base de datos en Excel para facilitar el análisis y la comparación de los resultados. Estos abarcan

detalles sobre los parámetros analizados, método de calibración, variedades de café estudiadas y aplicaciones de la técnica en la autenticación y control de calidad en el café.

2.2 Criterios de inclusión

La búsqueda se determinó con las palabras clave y combinaciones de “NIR Coffe and roasting, análisis, beans, adulteration, finca” como criterios específicos para obtener resultados relevantes. para la inclusión de los estudios en la revisión. No se considerarán revisiones.

3 Discusión de los Resultados de Revisión de literatura

3.1 Aplicación de técnicas de espectroscopía en el análisis del café

Las técnicas espectroscópicas han ganado interés en la industria alimentaria en los últimos años debido a su potencial para evaluar la composición química y calidad de los alimentos. Estas técnicas implican la interacción entre la materia y la radiación electromagnética, estos son los que proporciona información valiosa tanto cualitativa como cuantitativa sobre las muestras. La espectroscopia de infrarrojo cercano (NIRS) se destaca como una técnica no destructiva y rápida que permite la evaluación de la composición química de los granos de café, facilitando la identificación de su origen geográfico y la detención de fraudes alimentarios (Santos-Rivera et al., 2024). La NIRS permite la cuantificación de compuestos químicos en muestras de café, como la cafeína, trigonelina y los ácidos clorogénicos, que son fundamentales para definir las propiedades sensoriales del café (Correia et al., 2020). El análisis NIRS está acompañado en su implementación de modelos de calibración robustos mediante NIRS permite a los productores y exportadores asegurar la calidad y autenticidad de sus productos, lo que puede resultar en mejores precios y una mayor confianza del consumidor (Ayu et al., 2023). A continuación se amplían los alcances observados en la aplicación NIRS en el análisis del Café.

3.2 Tostado y monitoreo de café

El proceso de tueste en los granos de café es fundamental para desarrollar su sabor y aroma característico. A lo largo de este proceso de tueste, los granos de café verde se someten a temperaturas que oscilan entre 200°C y 260°C, durante intervalos de tiempo que varían según el tipo de tueste que se desee obtener. Por ejemplo, el café tradicional Hard/Rioysh se tuesta a 240°C durante 15 min, mientras que el Hard/Rioysh extrafuerte se tuesta a 260°C por el mismo tiempo (Baqueta et al., 2020). Este proceso no solo transforma el color de los granos, que pasa de verde a marrón, sino que también altera

su composición química, afectando la cantidad de compuestos como los ácidos clorogénicos y la cafeína, lo que a su vez influye en las propiedades organolépticas del café final (Chu et al., 2018). Un control preciso de la temperatura y el tiempo es crucial, ya que un tueste inadecuado puede resultar en sabores defectuosos, como el quemado o el horneado. La tabla 1. Muestra algunos alcances de la NIRS en el seguimiento del tueste del café. Baqueta y colaboradores 2020, evaluaron por NIRS la granulometría, el contenido de humedad, el color y el tiempo de infusión de granos de café tostados comercialmente mediante métodos de referencia, la aplicación de mínimos cuadrados parciales (PLS), el modelamiento mostró capacidad predictiva y alta sensibilidad con coeficiente de correlación entre 0,73 y 0,84.

Tabla 1. Aplicaciones de la NIRS en el tueste de café.

Referencia	Técnica NIRs	Muestra	Condiciones NIR	Análisis	Alcances	Comparación primaria
(Catelani et al., 2018)	NIR detectora de (InGaAs) y controlado mediante un software bomen-grams	Tueste de granos de café arábica y robusta	NIR, sonda de reflectancia difusa, Promedio de 64 escaneos con una resolución de 8 cm ⁻¹ entre 10.000 a 4000 cm ⁻¹ .	Análisis del proceso de tuestado del café en tiempo real	Metodología MSPC capaz de detectar perturbaciones en el proceso de tuestado	Proceso de tuestado convencional
(Yergenson & Aston, 2020)	FT-NIR Si-Ware NeoSpectra SWS62221-2.5 (Si-Ware Systems, El Cairo, Egipto)	Granos de café arábica	Espectro con un rango de (1350-2500 nm) Seguimiento cada 10 s durante el tueste.	Análisis de cuantificación y calidad	Análisis del grado del tueste para control la acidez	acidez titulable
(Benes et al., 2020)	FT-NIR multipropósito MPA™ de Bruker (Bruker, Ettlingen, Alemania).	Granos de café arábica y robusta (tostado)	Medición de reflexión difusa dentro del rango de 12.500-3800 cm ⁻¹ (resolución 16 cm ⁻¹ ; velocidad de exploración 10 kHz), Software OPUS 7.2 (Bruker, Ettlingen, Alemania).	Clasificación de tuestado y análisis de los espectros de NIRS	Diferenciación entre niveles de tuestado en los granos de café y análisis de fluctuación sin tendencia y el índice de estabilidad del rendimiento para evaluar los espectros del infrarrojo cercano	N/A
(Baqueta et al., 2020)	microNIR (MicroNIR™ 1700; JDS Uniphase Corporation)	Granos de café arábica y robusta (molido y tostado)	Región NIR (910-1676 nm) Reflectancia difusa microNIR.	Análisis de calidad	Parámetros de control de calidad en la industria del café tostado	Métodos tradiciones: granulometría, color, contenido de humedad y el tiempo de infusión.
(Chu et al., 2018)	ImSpector N17E, fabricado por Spectral Imaging Ltd.	Granos de café	Rango espectral de 874 a 1734 nm. Se configuró en una cámara oscura para evitar la luz ambiental	Análisis de calidad	Evaluación de los grados de tueste	N/A

La NIRS en modo de reflectancia difusa, combinada con el control estadístico de procesos multivariantes (MSPC) basado en el análisis de componentes principales (PCA), permite el monitoreo en tiempo real del proceso de tueste del café. Catalani y colaboradores, 2018, establecieron las diferencias de la capacidad antioxidante total (TAC) y el contenido fenólico total (TPC) en café durante el proceso de tostado mediante la adquisición en tiempo real de espectros NIRS, obteniendo valores de selectividad superiores al 12% y coeficientes de determinación (R^2) por encima de 0,90 (Catelani et al., 2018), lo que representa un avance en el control de calidad del proceso de tueste del café en tiempo real, que permite la toma de decisiones operativos para evitar la producción de lotes defectuosos y disminuir costos en la producción.

La diferenciación entre los niveles de tueste del café se manifiesta claramente a través de sus características espectrales y composicionales. el índice de estabilidad del rendimiento (YSI) y el análisis de fluctuación sin tendencia (DFA) fueron utilizados por Benes y colaboradores, 2020, en espectros NIR de diferentes niveles de tostado de muestras de café; mientras que el YSI no pudo diferenciar los granos verdes de los tostados el DFA diferenció con éxito las muestras verdes de las tostadas, reforzado por una agrupación jerárquica aglomerativa 100% precisa. Los espectros de los granos de café crudo exhibieron mayor intensidad de absorbancia en el rango de 8500 a 3800 cm^{-1} en comparación con los granos tostados, cuya absorbancia disminuye a medida que aumenta el tiempo de tueste. Esto se debe a la pérdida de agua y a las transformaciones químicas que ocurren durante el proceso de tueste, como las reacciones de Maillard y la degradación de compuestos como proteínas y ácidos clorogénicos (Benes et al., 2020).

En otro estudio, Yergenson y colaboradores, 2020, implementaron la técnica de NIRS para evaluar el grado de tueste de café y su correlación con la acidez titulable. Emplearon un espectrómetro NIR de transformada de Fourier Si-Ware en el rango de 1350 a 2500 nm, desarrollaron una escala de "oscuridad NIR" que mostró una disminución continua a medida que avanzaba el tueste, comenzando en valores cercanos a 0.3 para el café verde y alcanzando valores tan bajos como -0.04 al final del segundo crack. La acidez titulable, un indicador clave del sabor, alcanzó su punto máximo cerca del final del primer crack y disminuyó en tuestes más oscuros. La pendiente de correlación estableció que por cada 5 minutos de tueste se disminuye aproximadamente un 14% de la acidez máxima. Ambos indicadores, instauran que la NIRS es un insumo importante para los tostadores al medir el grado de tueste en tiempo real y su correlación con la acidez (Yergenson & Aston, 2020).

3.3 Predicción de la calidad del café y los atributos sensoriales

El análisis sensorial del café es fundamental para garantizar su calidad y satisfacer las expectativas del consumidor. La tabla 2. Exhibe algunos estudios asociados con la predicción de la calidad del café y loa comparación con atributos sensorias con respecto

a la técnica NIRS. Baqueta y colaboradores en 2021, estableció altas correlaciones entre el análisis sensorial y los espectros obtenidos con un NIR portátil, combinado con análisis de mínimos cuadrados y análisis discriminante (PLS-DA). La sensibilidad y especificidad del modelo estuvieron entre 91 y 100%, 84–100% y 73–95% en los conjuntos de entrenamiento, predicción y validación cruzada interna, respectivamente para identificar y evaluar aroma, sabor y textura, que son cruciales para la apreciación del producto (Baqueta et al., 2021).

Tabla 2. NIRS en la calidad de café y comparación con atributos sensoriales

Referencia	Técnica	Matriz	Condiciones técnicas del NIR	Análisis	Alcances
(de Araújo et al., 2021)	FT-NIRS	Café tostado café gourmet, superior y tradicional	FT-NIR, modelo Analect Diamond 20. Rango de 4000 a 10000 cm ⁻¹ reflectancia difusa, de Applied Instrument Technologies®. Resolución espectral de 8 cm ⁻¹ e integrando 32 escaneos.	Análisis de clasificación	Autenticación de café gourmet, superior (mezcla de gourmet/tradicional) y tradicional
(Baqueta et al., 2021)	MicroNIR	Granos de café café arábica tostado y molido	Micronir™ 1700 portátil de JDSU. Rango de 906-1676 nm, con una media de 32 escaneos. El blanco se evaluó utilizando un estándar de reflectancia NIR (Spectralon™)	Análisis cualitativo y calidad	Predicción de atributos sensoriales y análisis de calidad
(Silva et al., 2017)	NIRS	Granos de café arábica (molido)	NIR Spectrum 100 N (Perkin-Elmer Corp., Norwalk, CT) que cubre un rango de 4000-10.000 cm ⁻¹ de números de onda con una resolución espectral de 2cm ⁻¹ .	Análisis de calidad	Análisis de calidad del los granos de café molido y detención de los bgs (granos negros, verde y agrios)
(Caporaso et al., 2022)	Cámara espectral SWIR (Specim Ltd., Oulu, Finlandia)	Frijol Café verde arábica y robusta	El sistema HSI fue suministrado por Gilden Photonics Ltd con un rango espectral ~ 900-2500 nm. Resolución espectral de 6 nm. La cámara con detector refrigerado de 14 bits de 320 x 256 píxeles de mercurio-cadmio (HgCdTe) y un espectrógrafo N25E	Análisis sensorial	Predicción del aroma de café

La aplicación de imágenes hiperespectrales (1000–2500 nm) por Caparaso y colaboradores, 2022, permitió correlacionar y predecir el contenido de compuestos volátiles en granos de café tostados individuales con métodos primarios como la microextracción en fase sólida-cromatografía de gases-espectrometría de masas y cromatografía de gases-olfactometría. Los modelos de regresión (PLS) de mínimos cuadrados parciales para compuestos volátiles individuales y clases químicas obtuvieron detección rápida (R^2 mayor a 0,7, RPD ~ 1,5) y predicciones específicas de aldehídos y pirazinas (R^2 ~ 0,8, RPD ~ 1,9). Los alcances permiten la clasificación de cafés según su perfil sensorial, lo que proporciona herramientas valiosas para la industria del café (Caporaso et al., 2022).

Los compuestos químicos como las proteínas, lípidos, azúcares y ácidos carboxílicos, además del agua, son importantes para la discriminación de las clases de café. Estos compuestos pueden ser medidos mediante espectroscopia en el infrarrojo cercano (NIRS) para inferir la calidad del café. Silva y colaboradores, presenta la comparación entre la NIRS y la Espectroscopia de ruptura inducida por láser (LIBS) por ambos métodos con correlaciones lineales, superiores a $r^2=0.9$, observaron que los granos de café de alta calidad contienen mayores cantidades de lípidos, azúcares y proteínas, mientras que los granos defectuosos, como los negros, verdes y ácidos, presentan menores concentraciones de estos compuestos, lo que afecta negativamente la calidad sensorial de la bebida resultante, los (Silva et al., 2017).

El café se clasifica conforme a su calidad y características. Según la Asociación Brasileña de la industria del café (ABIC), el café se divide en tres características especiales: café tradicional, café superior y café gourmet (Soares & Dornella, 2023). El café Gourmet se caracterizan por su calidad diferenciada, este se evalúa a través de un análisis sensorial que considera atributos como el aroma, la acidez, el cuerpo, la astringencia y el amargor. Estos cafés deben obtener una puntuación Global de Calidad (GQ) superior a 7.3, lo que indica la ausencia de granos defectuosos y la presencia de características sensoriales excepcionales En la cata, se busca que el café exhiba notas distintivas que pueden incluir matices dulces, afrutados o florales, así como un cuerpo pleno y una acidez equilibrada, lo que contribuye a una experiencia de degustación superior. De Araujo y colaboradores en 2021 implementaron los modelos PLS, SIMCA e histogramas de CACHAS para estimar la calidad y autenticación de granos de café logrando identificaciones del 100% de las muestras comparadas con respecto al panel sensorial (de Araújo et al., 2021).

Rocha Baqueta y colaboradores en 2021, evaluaron diversos atributos sensoriales de mezclas de café, destacando diversas propiedades. Las mezclas de café que se implementaron estaban compuestas por diferentes tipos de granos, específicamente de las variedades Café arábica y Café canephora (Robusta). Se elaboraron cuatro mezclas con distintos perfiles de tueste. Las condiciones del análisis de NIRS para esta investigación incluyeron el uso de un espectrómetro NIR portátil (microNIR™ 1700) para analizar directamente los polvos de café. Se registraron los espectros de reflectancia de cada muestra en el rango de 906 a 1676 nm, realizando 32 escaneos. De igual forma, emplearon un método de análisis de datos multibloque (ComDim), para correlacionar los espectros NIRS con propiedades sensoriales como la fragancia en polvo, el aroma de la bebida, la acidez, el amargor, el sabor, el cuerpo, la astringencia, el sabor residual y la calidad general. Los resultados indicaron que los metabolitos como la trigonelina, la cafeína y los ácidos clorogénicos estaban relacionados con atributos sensoriales positivos, mientras que otros compuestos como el N-metilpiridinio y los ácidos quinicos se asociaron con características de menor calidad (Baqueta et al., 2021).

El equipo de espectroscopia en el infrarrojo cercano (NIRS) presenta varias limitaciones que deben ser consideradas en su aplicación en la industria del café. Aunque los resultados de clasificación son prometedores, se ha observado que algunos ejemplos no fueron correctamente clasificados o presentaron valores predichos muy cercanos al umbral de clasificación. Esto sugiere que, aunque el NIRS puede ser útil para reducir el número de muestras que deben ser evaluadas por los catadores, no puede reemplazar completamente el método de cata tradicional, especialmente en muestras de menor calidad, donde la tasa de clasificación correcta disminuye significativamente. De igual forma, a sensibilidad y especificidad del modelo PLS-DA varían según la calidad del café, lo que indica que el rendimiento del NIRS puede verse afectado por la variabilidad en la calidad de las muestras analizadas.

3.4 Predicción de la composición química del café y comparación entre métodos

El café es una bebida compleja cuya composición química incluye una variedad de compuestos bioactivos que contribuyen a sus características sensoriales y beneficios para la salud. Entre los componentes más destacados se encuentran la cafeína, que varía entre 0.68% y 1.5% en los granos de café arábica, y el ácido clorogénico (5-CQA), que puede alcanzar hasta un 5.2% en la misma variedad. Otro compuesto importante es la trigonelina, cuya concentración oscila entre 0.68% y 1.77%. Además, el café contiene azúcares, lípidos, proteínas y minerales esenciales como potasio, magnesio y calcio, que son influenciados por factores como el tipo de suelo y las condiciones de cultivo. (Ribeiro et al., 2021)(da Silva Araújo et al., 2020). La tabla 3, resume algunos alcances de la NIRS en la composición química del café.

Tabla 3. NIRS en la determinación de la composición química del café.

Referencia	Técnica	Matriz	Condiciones	Análisis	Alcances	Comparación primaria
(Budiastra, 2020)	FT-NIRS	Granos de café intactos verde arabica java preanger	NIRFlex N-500 (BUCHI Labortechnik AG, Suiza), modo de reflectancia difusa. Número de onda de 10000 cm ⁻¹ a 4000 cm ⁻¹ (1000–2500 nm). Temperatura 22° C y 25° C.	Análisis de trigonelina y ácido clorogénico	Calibración y validación del análisis.	Cromatografía líquida
(Okubo & Kurata, 2019)	NIRS	Granos de café importaciones de café verde (Cuba, Etiopia Tanzania, Yemen e Indonesia [Bari, Java y Sumatra])	NIR S-7100 (Soma Optics Ltd., Tokio, Japón). Resolución 1 nm Rango: 1200 a 2500 nm	análisis de clasificación	Autenticación de los granos de café verde	N/a

Referencia	Técnica	Matriz	Condiciones	Análisis	Alcances	Comparación primaria
(Ribeiro et al., 2021)	NIRS	Granos de café arabica y canephora crudo	NIRSystems 6500 de infrarrojo cercano (Foss NIRSystems, Raamsdonksveer, Países Bajos) 256 escaneos Rango de 1100 a 2500 nm Resolución de 2 nm,	Análisis de compuestos presentes en granos de café crudo	Cuantificación de cafeína, trigonelina y ácido 5-cafeoilquínico en granos de café crudo	HPLC
(da Silva Araújo et al., 2020)	NIRS	Granos de café arabica	NIR AgriQuant (Q-Interline A/S, Dinamarca). Rango: 4000 y 10000 cm^{-1} , con intervalos de 8 cm^{-1} y 64 escaneos, Temperatura 18 °C y humedad relativa del 65%		Determinación de la conductividad eléctrica y la lixiviación de potasio.	

Ribeiro y colaboradores, 2021, estudiaron por NIRS y métodos quimiométricos el contenido de cafeína, trigonelina y ácido 5-cafeoilquínico en granos de café crudos, utilizaron matrices diferentes especies y variedades de café, sus modificaciones y mezclas binarias o enriquecidas con compuestos puros y los compararon con espectros de las sustancias puras; los modelos de predicción presentaron RMSEP de 0,08, 0,07 y 0,27 y r_{vc} de 0,98, 0,96 y 0,96, respectivamente. Por otro lado, da Silva y colaboradores, 2020, investigaron la relación de la conductividad y lixiviación del potasio mediante NIRS en granos de café verde, utilizando parámetros multivariados como PLS, la dispersión multiplicativa (MSC) se demostró que era posible estimar la conductividad con una correlación superior al 0.97, mientras que la lixiviación de potasio fue de 0.88, aportando que esta técnica puede predecir la calidad de las membranas celulares del grano de café.

Budiastra y colaboradores, 2020, compararon de los resultados de la NIRS con respecto a métodos primarios como la cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas (LCMS) para la determinación de la concentración de trigonelina y ácido clorogénico (CGA) en granos de café intactos. Los resultados de calibración y validación indicaron una alta precisión en la predicción de las concentraciones de trigonelina ($r=0.98$, $CV=1.63\%$, $RPD=2.98$) y CGA ($r=0.94$, $CV=2.75\%$, $RPD=2.27$), con la ventaja de ser una técnica no destructiva, su tiempo de análisis fue rápido. (Budiastra, 2020), Esto sugiere que NIRS no solo es viable, sino que también puede superar las limitaciones de los métodos tradicionales en términos de eficiencia y rapidez en la medición de compuestos clave en el café.

La técnica NIRS se ha destacado por ser una herramienta útil para la evaluación en tiempo real de la capacidad antioxidante total (TAC) y el contenido total de fenoles (TPC) en el café durante el proceso de tostado. Los resultados obtenidos mediante NIRS se

compararon favorablemente con los métodos de referencia tradicionales, como los ensayos de ABTS y Folin-Ciocalteu. Los modelos de regresión PLS (mínimos cuadrados parciales) desarrollados para estimar TAC y TPC mostraron coeficientes de determinación (R^2) superiores a 0.90, lo que indica una alta capacidad predictiva. Sin embargo, se observó que la técnica de Folin-Ciocalteu puede no ser la más adecuada para medir fenoles en muestras de café, sugiriendo que se deben considerar otros métodos analíticos para obtener una imagen más precisa de la composición química (Catelani et al., 2017).

La espectroscopia de infrarrojo cercano (NIRS) tiene como valor agregado, que permite hacer geolocalización de los granos de café. Okubo y kura en 2019, analizaron muestras de café verde de diferentes regiones utilizando el modelo de análisis de clases independientes suaves (SIMCA) para clasificar los granos según su área de producción. El análisis de componentes principales (PCA) realizado en este estudio mostró que las muestras de Yemen se agruparon de manera diferente en comparación con las demás, lo que sugiere variaciones significativas en su composición química. En particular, se observó que la región espectral entre 1850 y 1950 nm es crucial, ya que se asocia con la absorción de compuestos como C=O, H₂O, cafeína, ácidos clorogénicos, proteínas, lípidos y carbohidratos (Okubo & Kurata, 2019). Esta información es vital para entender cómo las características químicas de los granos de café pueden influir en su calidad y sabor y dar autenticación a la región de procedencia del grano.

3.5 Discriminación del café por especie, variedad y origen geográfico

La discriminación del café según su especie, variedad, y origen geográfico es un fenómeno notable en la industria cafetera. Por ejemplo, el café arábica, conocido por su calidad superior y sabor distintivo, a menudo se valora más que el robusta, que es más resistente, pero de menor calidad. Esta preferencia se ve reflejada en los precios del mercado, donde el arábica puede alcanzar valores significativamente más altos (de Carvalho Couto et al., 2021). La procedencia geográfica del café también influye en su percepción; cafés de regiones específicas, como Colombia o Brasil, son aclamados por sus perfiles de sabor únicos, lo que genera una jerarquía en la calidad del café y que requiere de herramientas analíticas validadas para garantizar su autenticación. La tabla 4, muestra algunos estudios relacionados con la geolocalización de la especie y la variedad del café.

Tabla 4. NIRS y discriminación del café por geolocalización o variedad de especie.

Referencia	Técnica	Matriz	Condiciones	Análisis	Alcances	Comparación primaria
(Baqueta et al., 2023)	FT-NIR	Granos de café variedades de canephora y arábica	FT_NIR Perkin Elmer, Spectrum 100 N, . rango: 1000 a 2500 nm, resolución de 4 nm. Temperatura ambiente (22 °C). El blanco se evaluó utilizando un estándar de reflectancia NIR.	Análisis sensorial a partir de indicaciones geográficas	Identificación y cualificación de las especies de canephora y arábica.	N/a
(Ayu et al., 2023)	NIRS	Granos de café café arábica (gayo,lintong,manailing,) y café robusta(manailing)	NIRFlex N-500 (BUCHI Labortechnic AG Suiza) Rango: 1000 nm a 2500 nm. 488 muestras	Análisis de humedad	Cuantificación del % de agua	Método de gravimetría
(de Carvalho Couto et al., 2021)	FT-NIR	Granos de café arábica (Brasil, Colombia, Honduras). Adulterantes con café robusta (Vietnam Y Camerun), maíz, cebada, soja, arroz y cáscaras de café .	(FTLA 2000, ABB, Québec, QC, Canadá) Resolución de 8 cm ⁻¹ Rango: 4000-10.000 cm ⁻¹ . Software Bomen-Grams (versión 7, ABB, Québec, QC, Canadá).	Análisis de mezclas fraudulentas	Detección de adulterantes simples o múltiples	N/A
(Santos-Rivera et al., 2024)	FT-NIR	Granos de café arábica y café Yemen	Rango: 866 a 2532nm	Análisis de calidad	Trazabilidad en café y sostenibilidad en el sector cafetero	RMN y isotope fingerprinting
(Zhang et al., 2017)	HIS-NIR	Granos de café de 4 cultivares diferentes: Fushan Robusta, Xinglong Robusta , Catimor Arábica ,Typica Arábica	ImSpector N17E (Spectral Imaging Ltd., Oulu, Finland). Rango espectral de 874 a 1734 nm.	Análisis de cafeína	Cuantificación de cafeína	HPLC

El café Robusta Amazónico, cultivado en la región de Matas de Rondônia, ha sido reconocido con una Denominación de Origen (DO), lo que le otorga un estatus especial y lo distingue de otros cafés de menor calidad. En contraste, el Conilon de Bahía, aunque de calidad intermedia, no cuenta con la misma protección geográfica, lo que puede afectar su percepción en el mercado. De igual forma, las diferencias en el procesamiento, como la fermentación inducida utilizada por los productores indígenas, contribuyen a la variabilidad en la calidad y el perfil sensorial de los cafés, lo que a su vez influye en su valoración por parte de los consumidores. Baqueta y colaboradores, 2023, pudieron diferenciar el café Robusta del Conilon de Bahia mediante seguimiento de las absorbancias combinadas de carbohidratos, ácidos clorogénicos, lípidos, cafeína y proteínas entre 1400 a 2500 nm. Los estudios estadísticos multivariados de agrupamiento encontraron correlaciones superiores a 0.935 en la diferenciación de especies.(Baqueta et al., 2023).

Por otro lado, Suhandy y colaboradores, 2022, implementaron la técnica de NIRS para discriminar entre los cafés arábica y robusta, empleando un espectrómetro portátil y análisis quimiométrico. Los resultados obtenidos muestran una clara diferenciación entre las dos variedades de café. Los datos espectrales originales y preprocesados en la región de 1175 a 1650 nm revelaron que el café arábica presenta una mayor intensidad de absorbancia en comparación con el robusta. Esta diferencia sugiere que es posible distinguir entre las dos variedades basándose en sus características espectrales. El análisis de componentes principales (PCA) mostró una separación clara entre las muestras de café arábica y robusta, con un 96% de la varianza total explicada por los primeros tres componentes principales. En cuanto a los análisis de clustering jerárquico (HCA), estos complementaron los hallazgos del PCA, mostrando dos clústeres distintos para el café arábica y robusta en un dendrograma. La distancia relativa de 5.25 entre los clústeres indica una separación efectiva sin predicciones erróneas, lo que refuerza la validez de los resultados obtenidos a través de NIRS (Suhandy et al., 2022).

3.6 Detección de granos defectuosos y adulterantes en el café

La adulteración del café es un problema significativo que afecta la calidad y la integridad del producto. Los hallazgos de este estudio subrayan la necesidad de implementar técnicas de detección rápidas y accesibles, como la espectroscopía NIR, que pueden ser utilizadas en el campo para asegurar la calidad del café. La tabla 5. Muestra algunos alcances de la NIRS en el área de las adulteraciones del café.

Tabla 5. NIRS en la detección de granos defectuosos y adulteraciones de café.

Referencia	Técnica	Matriz	Condiciones	Análisis	Alcances	Comparación primaria
(Correia et al., 2018)	microNIRS	Granos de café arábica, café robusta, cascaras y maíz	Viavi MicroNIR™ Pro 1700. Rango de 1676 a 908 nm, con 400 escaneos. Calibración multivariante por mínimos cuadrados parciales (PLS) y análisis de componentes principales (PCA).	Análisis de adulterantes en café arábica	Identificación y cuantificación de adulterantes	N/a
(Correia et al., 2020)	microNIR Pro 1700 de (Viavi Solutions Inc	Granos de café sombreado (café canephora)	Viavi MicroNIR™ Pro 1700. Rango de 1676 a 908 nm,	análisis sensorial e identificación química del café	Identificación química y calidad del café	Ionización por electrospray, iones por transformada de Fourier, espectrometría de masas por resonancia ciclotrón.
(Forchetti & Poppi, 2020)	HIS-NIR.	Granos de café robusta, maíz, cascara, palos, tierra	imágenes Spotlight 400 N FT-NIR de Perkin-Elmer . 32 escaneos. Rango de 4000 a 7800 cm^{-1} , píxeles con 25 μm^2 , área monitoreada de 4 mm^2 , 160 x 160 píxeles o 25.600 espectros por muestra.	análisis de adulterantes en café	Detención y cuantificación de adulterantes en café tostado y molido	N/a

Referencia	Técnica	Matriz	Condiciones	Análisis	Alcances	Comparación primaria
(Sahachair ungrueng et al., 2022)	HIS-NIR NIR-FTIR	Granos de café molido (arábica y robusta)	NIR-HSI: NIR (Specim FX17e, Spectral Imaging Ltd., Oulu, Finlandia). Rango 935-1720 nm con un intervalo de 3,5 nm, modo de reflectancia, velocidad de escaneo de 15 mm/s. NIR-FTIR: FTIR (Bruker Corporation, INVENIO-S, Ettlingen, Alemania) detector DLaTGS Rango: 4000 a 400 cm ⁻¹ intervalo de 4 cm ⁻¹ , modo de reflexión	análisis de mezclas fraudulentas	Cuantificación y cualificación de mezcla de café robusta en café arábica	N/A
(Tugnolo et al., 2019)	NIR mesa NIR Portable	Granos de café verde, tostado y molido	NIR (Corona Extreme, Zeiss, Alemania) de matriz de diodos (960-1650 nm, resolución espectral 2 nm). NIR portable (Aurora NIR, GraiNit, Italia). Rango: 960-1650 nm, resolución espectral 2 nm.	análisis cuantitativo y prueba comparativa entre dos equipos NIRS	Cuantificación de parámetros en tres diferentes mezclas (café verde, molido y tostado) y prueba comparativa entre un NIRS de mesa y un NIRS portatil.	N/A
(Boadu et al., 2023)	NIR portable NIR portátil (SCIOTM)	Grano de café robusta, café con cascara y café adulterado	NIR portátil (SCIOTM) Rango de 740 a 1070 nm Resolución de 1 nm para la recopilación de datos asistida por un teléfono inteligente (Samsung A21).	análisis cuantitativos y cualitativos	Cuantificación y cualificación del café robusta y sus adulterantes	Comparación NIR
(Yuwita et al., 2019)	NIRS FT-IR	Granos de café arábica solokradjo	Rango del espectro NIRS 1000-2500 nm). Software de espectroscopía (Unscrambler® X.1, Camo, EE. UU.).	análisis de cuantificación y calidad	Cuantificación del % de grasas y calidad en granos de café solokradjo	Método manual para la determinación del contenido de grasa
(Wójcicki, 2022)	espectrómetro MPA/FT-NIR (Bruker).	Granos de café arábica tostado y molido	Rango: 12500 a 400 cm ⁻¹ mediante la adición conjunta de 16 interferogramas a una resolución de 4 cm ⁻¹ .	Análisis de calidad	Tostado con sensorial	Métodos tradicionales de química húmeda

Correia y colaboradores, 2018, utilizaron la microNIRS para clasificar y estimar la concentración de adulterantes presentes en el café Arábica, realizaron un estudio donde implementaron un nuevo modelo de Análisis de Componentes Principales (PCA). En este modelo abarcaron todas las muestras que contienen mezclas de café Arábica, cáscaras/palos y maíz, resultando en un modelo más robusto. Los espectros de microNIR mostraron una buena separación para los adulterantes, donde PC1 < 0 separa las mezclas de café Arábica que contienen cáscaras/palos, y PC1 > 0 contiene las muestras con maíz. (Correia et al., 2018).

La detección de granos defectuosos y adulterantes en café es crucial para garantizar la calidad del producto final. Forchetti y colaboradores, 2020, combinaron las imágenes hiperespectrales en el infrarrojo cercano (NIR) con el algoritmo de resolución de curvas

multivariadas (MCR-ALS) para identificar y cuantificar adulterantes como cáscaras de café, granos de maíz tostados y en polvo, y otros contaminantes. Esta metodología permitió detectar adulteraciones en niveles superiores al 1% con un margen de error inferior al 4%, lo que resalta su eficacia en el control de calidad del café (Forchetti & Poppi, 2020). El uso de gráficos de control, obtenidos por esta técnica hiperespectral-NIR facilita la identificación de muestras adulteradas sin necesidad de valores de concentración específicos, lo que simplifica el proceso de evaluación de la integridad del café, aspecto de suma importancia cuando se encuentra en la línea de proceso industrial.

El acople de la espectroscopía de imagen hiperespectral en el infrarrojo cercano (NIR-HSI) con la espectroscopía de transformada de Fourier (FTIR) tienen un gran potencial para la detección de adulteraciones en el café. Sahachairungrueng y colaboradores, 2022, establecieron modelos cualitativos y cuantitativos utilizando técnicas de clasificación y regresión de máquinas de soporte vectorial (SVM), donde los modelos de NIR-HSI lograron una precisión de predicción del 98.04% para identificar la presencia de Robusta en muestras de Arabica, mientras que los modelos de FTIR alcanzaron una precisión del 97.06%. Esto indica que ambas técnicas son efectivas para clasificar y determinar los niveles de Robusta en mezclas de café (Sahachairungrueng et al., 2022). La información anterior es de gran importancia para una inspección primaria del grano lo cual permitiría toma de decisiones antes de su procesamiento.

En un reciente estudio, Baodu y colaboradores, 2023, se centraron en la detención de adulterantes en el café, específicamente en la adulteración de café Robusta con cáscaras de café y otros materiales. La espectroscopía NIRS usando el modelo de regresión de proyección sucesiva (SPA-PLS) diferenció con un coeficiente de determinación (R) de 0.9711 en el conjunto de calibración y 0.9897 en el conjunto de predicción entre café Robusta puro, cáscaras de café y muestras adulteradas. Las diferencias en los perfiles espectrales sugieren que los componentes químicos de las muestras adulteradas presentan características únicas que pueden ser detectadas. (Boadu et al., 2023).

3.7 Limitaciones del NIRS

El equipo de espectroscopia en el infrarrojo cercano (NIRS) presenta varias limitaciones que deben ser consideradas en su aplicación. En primer lugar, la precisión de las mediciones puede verse afectada por interferencias en los datos, como el ruido de fondo, picos superpuestos y variaciones en la línea base debido a la dispersión de la luz. Estas interferencias pueden complicar el proceso de calibración y validación, requiriendo métodos de pretratamiento de datos más complejos para obtener resultados confiables. Baqueta y colaboradores, 2021, establecieron en un estudio de catación, que el método de NIRS si bien puede ser útil para reducir el número de muestras que deben ser evaluadas por los catadores, pero, no puede reemplazar completamente el método

de cata tradicional, especialmente en muestras de menor calidad, donde la tasa de clasificación correcta disminuye significativamente (Baqueta et al., 2021). Lo que indica que el rendimiento del NIRS puede verse afectado por la variabilidad en la calidad de las muestras analizadas. Ayu y colaboradores, 2023, estimaron que la influencia del contenido de agua en las muestras puede complicar aún más la interpretación de los datos, ya que el NIRS es particularmente sensible a la variabilidad en la concentración de agua, lo que puede llevar a inconsistencias en los modelos predictivos (Ayu et al., 2023). Por lo tanto, aunque el NIRS es una técnica prometedora para la evaluación no destructiva de la calidad del café, sus limitaciones deben ser cuidadosamente gestionadas para asegurar resultados precisos y representativos; requieren de estudios estadísticos que cada vez estén a la vanguardia de la agrupación de diferenciaciones con el fin de acercarse a las estimaciones sensoriales.

4 Conclusiones

El presente trabajo ha demostrado la efectividad de la espectroscopia de infrarrojo cercano (NIRS) como una herramienta no destructiva y rápida para la cuantificación y cualificación de los parámetros fisicoquímicos del café. A través de la revisión de diversos estudios, se ha evidenciado que NIRS no solo permite la identificación de adulterantes y granos defectuosos, sino que también facilita la clasificación de diferentes variedades de café, como Arábica y Robusta, basándose en sus características espectrales.

Los resultados obtenidos indican que la técnica NIRS puede alcanzar altos niveles de precisión en la predicción de compuestos clave, como cafeína y ácidos clorogénicos, lo que es fundamental para garantizar la calidad del producto final. Además, su capacidad para realizar análisis en tiempo real durante el proceso de tueste representa un avance significativo en el control de calidad, permitiendo a los productores optimizar sus métodos y asegurar la autenticidad de sus productos. En conclusión, la implementación de NIRS en la industria del café no solo mejora la eficiencia operativa, sino que también contribuye a la sostenibilidad y a la satisfacción del consumidor al garantizar un producto de alta calidad. La adopción de esta tecnología puede ser clave para enfrentar los desafíos actuales en la producción y comercialización del café, promoviendo prácticas más responsables y efectivas en el sector.

5 Referencias

- Adnan, A., von Hörsten, D., Pawelzik, E., & Mörlein, D. (2017). Rapid prediction of moisture content in intact green coffee beans using near infrared spectroscopy. *Foods*, 6(5), 38.
- Amalia, F., Aditiawati, P., Yusianto, Putri, S. P., & Fukusaki, E. (2021). Gas chromatography/mass spectrometry-based metabolite profiling of coffee beans obtained from different altitudes and origins with various postharvest processing. *Metabolomics*, 17, 1-16.

- Beć, K. B., Grabska, J., & Huck, C. W. (2022). Miniaturized NIR spectroscopy in food analysis and quality control: Promises, challenges, and perspectives. *Foods*, 11(10), 1465.
- Benitez, V., Rebollo-Hernanz, M., Hernanz, S., Chantres, S., Aguilera, Y., & Martin-Cabrejas, M. A. (2019). Coffee parchment as a new dietary fiber ingredient: Functional and physiological characterization. *Food Research International*, 122, 105-113.
- Boadu, V. G., Teye, E., Amuah, C. L., Lamptey, F. P., & Sam-Amoah, L. K. (2023). Portable NIR Spectroscopic Application for Coffee Integrity and Detection of Adulteration with Coffee Husk. *Processes*, 11(4), 1140.
- Budiastra, I. W. (2020). Determination of trigonelline and chlorogenic acid (CGA) concentration in intact coffee beans by NIR spectroscopy. *Agricultural Engineering International: CIGR Journal*, 22(1), 162-168.
- Caporaso, N., Whitworth, M. B., Grebby, S., & Fisk, I. D. (2018). Non-destructive analysis of sucrose, caffeine and trigonelline on single green coffee beans by hyperspectral imaging. *Food Research International*, 106, 193-203.
- Cortés-Macías, E. T., López, C. F., Gentile, P., Girón-Hernández, J., & López, A. F. (2022). Impact of post-harvest treatments on physicochemical and sensory characteristics of coffee beans in Huila, Colombia. *Postharvest biology and technology*, 187, 111852.
- Ercan, M. S. F., Ayyıldız, M. F., Chormey, D. S., & Bakırdere, S. (2021). Determination of copper in traditional coffee pot water samples by flame atomic absorption spectrometry and matrix matching calibration strategy after switchable solvent based liquid-phase microextraction. *Environmental Monitoring and Assessment*, 193, 1-7.
- Federación Nacional de Cafeteros de Colombia. (2024). Informe mensual mayo 2024, Dirección de Investigaciones Económicas. 14p. Acceso on line. <https://federaciondecafeteros.org/app/uploads/2024/06/Informe-mensual-mayo-p.pdf>.
- Giraud, A., Grassi, S., Savorani, F., Gavoci, G., Casiraghi, E., & Geobaldo, F. (2019). Determination of the geographical origin of green coffee beans using NIR spectroscopy and multivariate data analysis. *Food Control*, 99, 137-145.
- Grassi, S., Giraud, A., Novara, C., Cavallini, N., Geobaldo, F., Casiraghi, E., & Savorani, F. (2023). Monitoring chemical changes of coffee beans during roasting using real-time NIR spectroscopy and chemometrics. *Food Analytical Methods*, 16(5), 947-960.
- Nakilcioğlu-Taş, E., & Ötleş, S. (2019). Physical characterization of Arabica ground coffee with different roasting degrees. *Anais da Academia Brasileira de Ciências*, 91(02), e20180191.
- Nóbrega, R. O., da Silva, S. F., Fernandes, D. D., Lyra, W. S., de Araújo, T. K., Diniz, P. H., & Araújo, M. C. (2023). Classification of instant coffees based on caffeine content and roasting degree using NIR spectrometry and multivariate analysis. *Microchemical Journal*, 190, 108624.
- Núñez, N., Saurina, J., & Núñez, O. (2021). Authenticity assessment and fraud quantitation of coffee adulterated with chicory, barley, and flours by untargeted HPLC-UV-FLD fingerprinting and chemometrics. *Foods*, 10(4), 840.
- Yuwita, F., Ifmalinda, I. y Makky, M. (2023). Predicción de cafeína y proteína de los granos de café arábica mediante espectroscopía del infrarrojo cercano (NIRS). <https://jurnal.fp.unila.ac.id/index.php/JTP/article/view/6798>
- Zhu, M., Long, Y., Chen, Y., Huang, Y., Tang, L., Gan, B., ... & Xie, J. (2021). Fast determination of lipid and protein content in green coffee beans from different origins using NIR

- spectroscopy and chemometrics. *Journal of Food Composition and Analysis*, 102, 104055.
- Adnan, A., Naumann, M., Mörlein, D., & Pawelzik, E. (2020). Reliable Discrimination of Green Coffee Beans Species: A Comparison of UV-Vis-Based Determination of Caffeine and Chlorogenic Acid with Non-Targeted Near-Infrared Spectroscopy. *Foods*, 9(6), 788. <https://doi.org/10.3390/foods9060788>
- Aouadi, B., Vitalis, F., Bodor, Z., Zinia Zaukuu, J.-L., Kertesz, I., & Kovacs, Z. (2022). NIRS and Aquaphotomics Trace Robusta-to-Arabica Ratio in Liquid Coffee Blends. *Molecules*, 27(2), 388. <https://doi.org/10.3390/molecules27020388>
- Ayu, P. C., Sebayang, N. U. W., & Sinamo, K. N. (2023). Environmentally friendly method in determining the water content of coffee by NIR Spectroscopy. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 1241(1), 012064. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/1241/1/012064>
- Baqueta, M. R., Alves, E. A., Valderrama, P., & Pallone, J. A. L. (2023). Brazilian Canephora coffee evaluation using NIR spectroscopy and discriminant chemometric techniques. *Journal of Food Composition and Analysis*, 116, 105065. <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2022.105065>
- Baqueta, M. R., Coqueiro, A., Março, P. H., & Valderrama, P. (2020). Quality Control Parameters in the Roasted Coffee Industry: a Proposal by Using MicroNIR Spectroscopy and Multivariate Calibration. *Food Analytical Methods*, 13(1), 50–60. <https://doi.org/10.1007/s12161-019-01503-w>
- Baqueta, M. R., Coqueiro, A., Março, P. H., & Valderrama, P. (2021). Multivariate classification for the direct determination of cup profile in coffee blends via handheld near-infrared spectroscopy. *Talanta*, 222, 121526. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2020.121526>
- Benes, E., Fodor, M., Kovács, S., & Gere, A. (2020). Application of Detrended Fluctuation Analysis and Yield Stability Index to Evaluate Near Infrared Spectra of Green and Roasted Coffee Samples. *Processes*, 8(8), 913. <https://doi.org/10.3390/pr8080913>
- Boadu, V. G., Teye, E., Amuah, C. L. Y., Lamptey, F. P., & Sam-Amoah, L. K. (2023). Portable NIR Spectroscopic Application for Coffee Integrity and Detection of Adulteration with Coffee Husk. *Processes*, 11(4), 1140. <https://doi.org/10.3390/pr11041140>
- Budiastra, I. W., Sutrisno, Widyotomo, S., & Ayu, P. C. (2018). Prediction of Caffeine Content in Java Preanger Coffee Beans by NIR Spectroscopy Using PLS and MLR Method. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 147, 012004. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/147/1/012004>
- Caporaso, N., Whitworth, M. B., & Fisk, I. D. (2022). Prediction of coffee aroma from single roasted coffee beans by hyperspectral imaging. *Food Chemistry*, 371, 131159. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.131159>
- Catelani, T. A., Páscoa, R. N. M. J., Santos, J. R., Pezza, L., Pezza, H. R., Lima, J. L. F. C., & Lopes, J. A. (2017). A Non-invasive Real-Time Methodology for the Quantification of Antioxidant Properties in Coffee During the Roasting Process Based on Near-Infrared Spectroscopy. *Food and Bioprocess Technology*, 10(4), 630–638. <https://doi.org/10.1007/s11947-016-1843-6>
- Catelani, T. A., Santos, J. R., Páscoa, R. N. M. J., Pezza, L., Pezza, H. R., & Lopes, J. A. (2018). Real-time monitoring of a coffee roasting process with near infrared spectroscopy using

- multivariate statistical analysis: A feasibility study. *Talanta*, 179, 292–299. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2017.11.010>
- Chu, B., Yu, K., Zhao, Y., & He, Y. (2018). Development of Noninvasive Classification Methods for Different Roasting Degrees of Coffee Beans Using Hyperspectral Imaging. *Sensors*, 18(4), 1259. <https://doi.org/10.3390/s18041259>
- Correia, R. M., Andrade, R., Tosato, F., Nascimento, M. T., Pereira, L. L., Araújo, J. B. S., Pinto, F. E., Endringer, D. C., Padovan, M. P., Castro, E. V. R., Partelli, F. L., Filgueiras, P. R., Lacerda, V., & Romão, W. (2020). Analysis of Robusta coffee cultivated in agroforestry systems (AFS) by ESI-FT-ICR MS and portable NIR associated with sensory analysis. *Journal of Food Composition and Analysis*, 94, 103637. <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2020.103637>
- Correia, R. M., Tosato, F., Domingos, E., Rodrigues, R. R. T., Aquino, L. F. M., Filgueiras, P. R., Lacerda, V., & Romão, W. (2018). Portable near infrared spectroscopy applied to quality control of Brazilian coffee. *Talanta*, 176, 59–68. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2017.08.009>
- da Silva Araújo, C., Vimercati, W. C., Macedo, L. L., Ferreira, A., Prezotti, L. C., Teixeira, L. J. Q., & Saraiva, S. H. (2020). Predicting the Electric Conductivity and Potassium Leaching of Coffee by NIR Spectroscopy Technique. *Food Analytical Methods*, 13(12), 2312–2320. <https://doi.org/10.1007/s12161-020-01843-y>
- de Araújo, T. K. L., Nóbrega, R. O., Fernandes, D. D. de S., de Araújo, M. C. U., Diniz, P. H. G. D., & da Silva, E. C. (2021). Non-destructive authentication of Gourmet ground roasted coffees using NIR spectroscopy and digital images. *Food Chemistry*, 364, 130452. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.130452>
- de Carvalho Couto, C., Freitas-Silva, O., Morais Oliveira, E. M., Sousa, C., & Casal, S. (2021). Near-Infrared Spectroscopy Applied to the Detection of Multiple Adulterants in Roasted and Ground Arabica Coffee. *Foods*, 11(1), 61. <https://doi.org/10.3390/foods11010061>
- Forchetti, D. A. P., & Poppi, R. J. (2020). Detection and Quantification of Adulterants in Roasted and Ground Coffee by NIR Hyperspectral Imaging and Multivariate Curve Resolution. *Food Analytical Methods*, 13(1), 44–49. <https://doi.org/10.1007/s12161-019-01502-x>
- Monteiro, P. I., Santos, J. S., Alvarenga Brizola, V. R., Pasini Deolindo, C. T., Koot, A., Boerrigter-Eenling, R., van Ruth, S., Georgouli, K., Koidis, A., & Granato, D. (2018). Comparison between proton transfer reaction mass spectrometry and near infrared spectroscopy for the authentication of Brazilian coffee: A preliminary chemometric study. *Food Control*, 91, 276–283. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2018.04.009>
- Okubo, N., & Kurata, Y. (2019). Nondestructive Classification Analysis of Green Coffee Beans by Using Near-Infrared Spectroscopy. *Foods*, 8(2), 82. <https://doi.org/10.3390/foods8020082>
- Ribeiro, J. S., Salva, T. de J. G., & Silvarolla, M. B. (2021). Prediction of a wide range of compounds concentration in raw coffee beans using NIRS, PLS and variable selection. *Food Control*, 125, 107967. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2021.107967>
- Rocha Baqueta, M., Coqueiro, A., Henrique Marçõ, P., Mandrone, M., Poli, F., & Valderrama, P. (2021). Integrated ¹H NMR fingerprint with NIR spectroscopy, sensory properties, and quality parameters in a multi-block data analysis using ComDim to evaluate coffee blends. *Food Chemistry*, 355, 129618. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.129618>
- Sahachairungrueng, W., Meechan, C., Veerachat, N., Thompson, A. K., & Teerachaichayut, S. (2022). Assessing the Levels of Robusta and Arabica in Roasted Ground Coffee Using

- NIR Hyperspectral Imaging and FTIR Spectroscopy. *Foods*, 11(19), 3122. <https://doi.org/10.3390/foods11193122>
- Santos-Rivera, M., Montagnon, C., & Sheibani, F. (2024). Identifying the origin of Yemeni green coffee beans using near infrared spectroscopy: a promising tool for traceability and sustainability. *Scientific Reports*, 14(1), 13342. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-64074-9>
- Shan, J., Wang, X., Han, S., & Kondo, N. (2017). Application of Curve Fitting and Wavelength Selection Methods for Determination of Chlorogenic Acid Concentration in Coffee Aqueous Solution by Vis/NIR Spectroscopy. *Food Analytical Methods*, 10(4), 999–1006. <https://doi.org/10.1007/s12161-016-0650-z>
- Silva, T. V., Hubinger, S. Z., Gomes Neto, J. A., Milori, D. M. B. P., Ferreira, E. J., & Ferreira, E. C. (2017). Potential of Laser Induced Breakdown Spectroscopy for analyzing the quality of unroasted and ground coffee. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 135, 29–33. <https://doi.org/10.1016/j.sab.2017.06.015>
- Suhandy, D., Kusumiyati, & Yulia, M. (2022). Discrimination between arabica and robusta coffees using NIR-integrating sphere spectroscopy coupled with hierarchical clustering analysis. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 1038(1), 012034. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/1038/1/012034>
- Tugnolo, A., Beghi, R., Giovenzana, V., & Guidetti, R. (2019). Characterization of green, roasted beans, and ground coffee using near infrared spectroscopy: A comparison of two devices. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 27(1), 93–104. <https://doi.org/10.1177/0967033519825665>
- Wójcicki, K. (2022). Near-infrared spectroscopy as a green technology to monitor coffee roasting. *Foods and Raw Materials*, 295–303. <https://doi.org/10.21603/2308-4057-2022-2-536>
- Yergenson, N., & Aston, D. E. (2020). Online determination of coffee roast degree toward controlling acidity. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 28(4), 175–185. <https://doi.org/10.1177/0967033520924493>
- Yuwita, F., Ifmalinda, & Makky, M. (2019). Non-destructive Evaluation of Fat Content of Coffee Beans Solok Radjo Using Near Infrared Spectroscopy. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 327(1), 012005. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/327/1/012005>
- Zhang, C., Jiang, H., Liu, F., & He, Y. (2017). Application of Near-Infrared Hyperspectral Imaging with Variable Selection Methods to Determine and Visualize Caffeine Content of Coffee Beans. *Food and Bioprocess Technology*, 10(1), 213–221. <https://doi.org/10.1007/s11947-016-1809-8>

6 Anexos

6.1 Anexo I. Revistas donde se publican revisiones sistemáticas de la temática

Tabla 1. Resultados de la clasificación de modelado independiente suave de analogía de clases (SIMCA) ($\alpha = 0,05$). (Okubo & Kurata, 2019)

Muestra	No. en el conjunto de pruebas	Clasificación correcta %	Clasificación de varias categorías %	Clasificación incorrecta %	Sin categoría
1	15	86	13	0	0
2	15	73	26	0	0
3	15	93	7	0	0
4	15	80	13	0	7
5	15	100	0	0	0
6	15	80	13	7	0
7	15	80	20	0	0

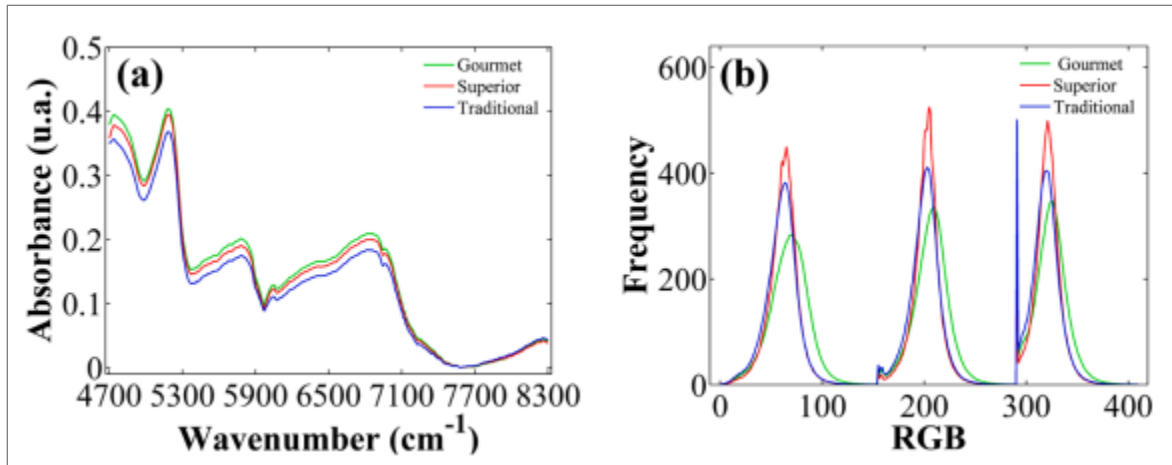


Figura 1. Espectros NIR promedio preprocesados con corrección de desplazamiento (a) e histograma RGB (b) de las muestras de café tostado molido Gourmet (línea verde), Superior (línea roja) y Tradicional (línea azul) estudiadas (de Araújo et al., 2021).



Figura 2. a) Accesorios del equipo MicroNIRS: 1) collarín; (2) soporte de viales; (3) Soporte para viales de 5 ml; y (4) collar con ventana, b) se muestra una imagen de un instrumento microNIRS conectado a una tableta (Correia et al., 2018).

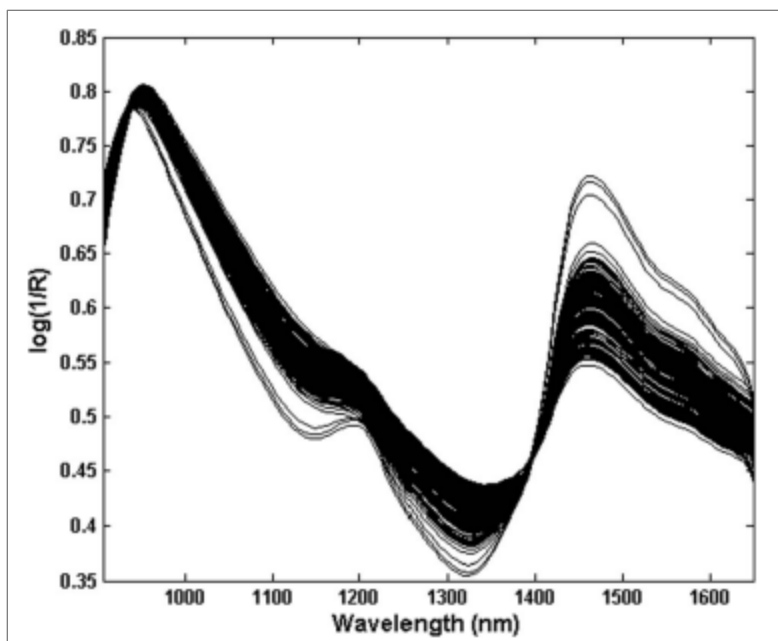


Figura 3. Espectros NIR de las muestras de café tostado (Baqueta et al., 2020)