



**Somos calidad,  
somos USC**

**Espectroscopia en el infrarrojo cercano: un review de las aplicaciones en el control de la calidad en el proceso Industrial de la caña de azúcar**

**Autor:**

**Joan Sebastian Davalos Sierra**

**Título por el que opta:  
Químico**

**Directores:**

**Dra. Julieth Orduña Ortega  
Dr. Jorge Andrés Mora Vargas**

**Grupo de Investigación:  
GIEMA**

**Línea de Investigación:  
Aseguramiento de la calidad**

**Facultad de Ciencias Básicas  
Química  
Universidad Santiago de Cali  
Santiago de Cali - Colombia  
2025**

## IMPACTOS

Relacione el (los) impacto(s) que presentó el Trabajo de Grado según los siguientes criterios:

IMPACTO	PRODUCTO	BENEFICIARIO(S)
<b>Económico</b>	Reducción de costos en los análisis de laboratorio y la optimización de la producción	Ingenios azucareros
<b>Responsabilidad social</b>	Aportación de conocimiento para una industria más sostenible	Comunidad científica
<b>Científico</b>	Aplicación de técnicas instrumentales secundarias para el análisis de materias primas y producto terminado en la industria azucarera	Industria sucroquímica
<b>Indicadores de Gestión</b>	Habilitación de herramientas de monitoreo en campo	Gestores de calidad
<b>Tecnológico</b>	Promoción de una técnica analítica avanzada para la agroindustria	Centros de investigación
<b>Técnico</b>	Validación de una metodología rápida y precisa	Operarios de campo y analistas de laboratorio
<b>Ambiental</b>	Disminución en el uso de reactivos y residuos ambientales	Medio ambiente y entorno
<b>Social</b>	Contribución a la economía y al empleo nacional	Comunidad agrícola y empresarial
<b>Cultural</b>	Fomentación de tecnologías innovadoras	Profesionales

## ESPECTROSCOPIA EN EL INFRARROJO CERCANO: UN REVIEW DE LAS APLICACIONES EN EL CONTROL DE LA CALIDAD EN EL PROCESO INDUSTRIAL DE LA CAÑA DE AZÚCAR

Joan Sebastián Davalos Sierra<sup>1</sup>, Jorge Andrés Mora Vargas<sup>1</sup>, Julieth Orduña Ortega.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Grupo de Investigación GIEMA, Programa de Química. Facultad de Ciencias Básicas. Universidad Santiago de Cali. Campus Pampalinda Calle 5 # 62-00. Santiago de Cali. Colombia

[joan.davalos00@usc.edu.co](mailto:joan.davalos00@usc.edu.co)

### RESUMEN

La industria azucarera, pilar económico de numerosos países tropicales como Colombia, requiere la adopción de métodos analíticos rápidos, sostenibles y eficientes para el control de calidad de la caña de azúcar desde su cultivo hasta su procesamiento en biorrefinerías. Los métodos convencionales, aunque efectivos, suelen ser lentos, costosos y ambientalmente desfavorables. En este contexto, la espectroscopia en el infrarrojo cercano (NIRS) surge como una alternativa prometedora, capaz de cuantificar con alta precisión parámetros clave como °Brix y contenido de fibra, alcanzando coeficientes de determinación ( $R^2$ ) superiores a 0.97, además de caracterizar la composición de la caña y del bagazo. Su eficacia se basa en la correlación de los espectros con propiedades químicas mediante modelos quimiométricos calibrados, lo que convierte al NIRS en una herramienta versátil, confiable y esencial para impulsar la optimización y sostenibilidad de la agroindustria azucarera.

**Palabras clave:** *Caña de azúcar, calidad, Modelos quimiométricos, espectroscopia infrarrojo cercano.*

### NEAR-INFRARED SPECTROSCOPY: A REVIEW OF APPLICATIONS IN QUALITY CONTROL IN THE SUGARCANE INDUSTRIAL PROCESS.

### ABSTRACT

The sugar industry, a key economic pillar in many tropical countries such as Colombia, requires the adoption of rapid, sustainable, and efficient analytical methods for quality control of sugarcane from cultivation to processing in biorefineries. Conventional methods, although effective, are often slow, costly, and environmentally unfavorable. In this context, near-infrared spectroscopy (NIRS) emerges as a promising alternative, capable of accurately quantifying key parameters such as °Brix and fiber content, achieving coefficients of determination ( $R^2$ ) above 0.97, while also enabling the characterization of cane and bagasse composition. Its effectiveness lies in correlating spectral data with chemical properties through calibrated chemometric models, making NIRS a versatile, reliable, and essential tool for enhancing the optimization and sustainability of the sugar agroindustry.

**Keywords:** *Sugar cane, quality, chemometric models, near infrared spectroscopy.*

### HIGHLIGHTS

- Aplicación de espectroscopia de infrarrojo cercano en el aseguramiento de la calidad de la industria de caña de azúcar
- La espectroscopia en el infrarrojo cercano se establece como una alternativa rápida, sostenible y precisa frente a los métodos tradicionales para el control de calidad en la industria azucarera.

## 1. INTRODUCCIÓN

La caña de azúcar (*Saccharum officinarum*) constituye un cultivo estratégico no solo para la obtención de azúcar y etanol, sino también como una fuente versátil de subproductos con alto potencial para la producción de energía, compuestos químicos y materiales de interés industrial. Entre estos subproductos, destaca el bagazo, un residuo fibroso generado durante la molienda, que presenta un notable valor económico y ambiental (Pandey et al., 2000). En Colombia, especialmente en los departamentos del Valle del Cauca y Cauca, el cultivo de caña de azúcar representa una actividad de gran relevancia social y económica. Tradicionalmente, este sector se ha enfocado en la producción de azúcar como alimento y de etanol como biocombustible para el programa nacional de oxigenación de gasolina con etanol (E10) (según la normativa del ministerio de minas y energía), el cual se estableció para que haya un menor uso de combustibles fósiles, esto con el fin de disminuir las emisiones de gases de efecto invernadero y fomentar el desarrollo de la economía rural. Sin embargo, en los últimos años se ha consolidado una visión gubernamental y gremial orientada a mejorar la productividad y sostenibilidad del cultivo, promoviendo la adopción del concepto de biorrefinería. Las biorrefinerías permiten el aprovechamiento integral de la biomasa de caña de azúcar para la obtención de múltiples productos de valor agregado, tales como biocombustibles (etanol), biomateriales y alimentos (azúcar), entre otros. Es gracias a esta visión que no solo hay variedad en la producción, sino que, también tiene un gran aporte a la economía del sector y el ambiente, consolidando las biorrefinerías como una alternativa de gran rentabilidad y viabilidad (Moncada et al., 2013).

Esto a llevado que el gremio agrícola y la comunidad científica adopten y creen programas de mejoramiento genético a nivel mundial. De este modo, el planteamiento tradicional, que tenía como función conseguir un mayor contenido de sacarosa, ha visto una evolución impulsada a un desarrollo de variedades genéticas de caña de azúcar con mayor rendimiento en su biomasa, con la finalidad de promover la producción de bioenergía. Esto lleva a la importancia en los controles de calidad de los distintos parámetros industriales, requiriendo la implementación de técnicas instrumentales que sean rápidas, económicas y por, sobre todo, precisas. Es ente contexto que la espectroscopia en el infrarrojo cercano (NIRS, *Near infrared spectroscopy*) se presenta como dicha herramienta estratégica que supera los retos requeridos por la industria al permitir análisis como °Brix, sacarosa y fibra. Son estas ventajas las que han posicionado la espectroscopia NIR como una tecnología fundamental para abordar los desafíos asociados al mejoramiento genético y a la valorización de la caña de azúcar (Sica et al., 2023).

La optimización de la industria y producción de la caña de azúcar, partiendo desde su cultivo hasta la biorrefinería donde será tratada, requiere de sistemas de control de calidad que sean rápidos y precisos que aseguren la calidad de la materia prima. Hasta ahora, estos parámetros se han determinado mediante métodos analíticos convencionales, los cuales suelen ser lentos, costosos y generar residuos contaminantes. En este contexto, el NIRS se presenta como una alternativa tecnológica capaz de superar estas limitaciones. En Colombia, se ha demostrado la viabilidad de esta técnica para la determinación de las propiedades químicas del suelo destinado al cultivo de caña de azúcar (Tabla 1), lo que evidencia su potencial para optimizar el control de calidad a lo largo de toda la cadena productiva (Delgadillo-Duran et al., 2022).

**Tabla 1.** Aplicación de la espectroscopia vis-NIR y *machine learning* para diagnóstico de suelos en Colombia (Delgadillo-Duran et al., 2022).

Análisis	Descripción y resultados	Interpretación
pH	R <sup>2</sup> = 0.81 (modelo cubist)	Precisión excelente, permite un monitoreo confiable de la alcalinidad del suelo
Calcio	R <sup>2</sup> = 0.55 (modelo cubist)	Precisión aceptable, determina enmiendas de calcio
Magnesio	R <sup>2</sup> = 0.44 (modelo cubist)	Precisión aceptable, adecuado para un análisis cuantitativo y/o cualitativo
Materia orgánica	R <sup>2</sup> = 0.37 (modelo SVR)	Precisión aceptable, útil para clasificar suelos según su fertilidad

Por otro lado, el jugo de caña de azúcar constituye la materia prima fundamental para la producción de azúcar, etanol y diversos derivados industriales. Su composición química, principalmente sacarosa, glucosa, fructosa, minerales y compuestos fenólicos, determina en gran medida la eficiencia de los procesos de extracción, clarificación y cristalización (Sica et al., 2023). Además, el jugo de caña conforma un sistema bioquímico complejo, ya que se ha demostrado la presencia de un pool enzimático activo, con enzimas reductasas altamente selectivas en la catálisis de transformaciones orgánicas. Factores como la variedad de la caña, la zona de cultivo y las condiciones de manejo postcosecha pueden influir significativamente en el contenido y la actividad de estas enzimas. Si bien los métodos analíticos tradicionales empleados para la caracterización del jugo de caña son precisos y sensibles, suelen requerir una preparación laboriosa de las muestras, el uso de solventes y equipos de alto costo, como la cromatografía de gases (GC). Frente a estas limitaciones, la espectroscopía en el infrarrojo cercano (NIR) representa una alternativa más rápida, económica y sostenible, aunque su aplicación efectiva depende del desarrollo de modelos de calibración robustos que garanticen la fiabilidad de los resultados. (Assunção et al., 2008).

El proceso de calidad industrial de la caña de azúcar es un proceso que va desde la materia prima hasta el producto intermedio, bajo estándares internacionales como referencia. Un estudio realizado por (Babeker & Mastafa, 2020) en las seis principales industrias azucareras de Sudán en el 2017 mostro una visión clara de los parámetros evaluados y revelo las áreas críticas donde la tecnología tradicional presenta limitaciones. En la evaluación de la caña de azúcar, parámetros clave como Brix, Pol, pureza y fibra se encuentran en rangos satisfactorios para cada fabrica, pero el parámetro de humedad presentaba desviaciones sistemáticas. Donde el rango recomendado se encuentra entre el 55-65%, el cual superaron todas las muestras. Exceso de humedad que disminuye la eficiencia de molienda, aumenta los costes energéticos para el secado y reduce el rendimiento en azucares recuperables. Además, sus parámetros físicos se encontraron por debajo de los estándares de referencia, por la influencia de factores agronómicos como la variedad y el clima. Por último, el control de azúcar crudo, producto intermedio, que se evalúa bajo los criterios de la ICUMSA revelo que en cuanto los parámetros físicos, la uniformidad del cristal excede el límite máximo (<0.08%) en cada fabrica estudiada, indicador de una cristalización no uniforme, y en cuanto a la humedad, que supero el límite critico (0.06%) en al menos la mitad de las fábricas, lleva a la formación terrones y al deterioro microbiano. Controles de Pol y pureza tampoco alcanzaron valores óptimos en varias instancias.

En el presente trabajo se llevó a cabo una revisión bibliográfica sobre las aplicaciones de la espectroscopía en el infrarrojo cercano (NIR) como técnica alternativa para el análisis de diversas matrices de interés en la industria azucarera. Esta es una técnica analítica basada en la absorción de radiación electromagnética en el rango de 700 a 2500 nm por los enlaces químicos presentes en las moléculas, principalmente C-H, O-H, N-H, entre otros, generando espectros característicos que pueden correlacionarse con las propiedades químicas de las muestras

mediante modelos de calibración multivariada (Pasquini, 2018). Esta técnica destaca por su rapidez, al no ser destructiva y por su capacidad de mediciones *in situ*, superando limitaciones de métodos tradicionales de laboratorio, o análisis instrumentales como la polarimetría, GC, calorimetría, entre otros (Phuphaphud et al., 2020). En la industria de la caña de azúcar, el NIRS ha demostrado eficacia en:

- Predicción de sacarosa y Brix: Con errores menores al 0.5% en jugo de caña (Meng et al., 2019; Sorol et al., 2010).
- Medición de fibra y humedad: Optimizando procesos de molienda y reduciendo pérdidas (Njume et al., 2025a).
- Detección de impurezas: como cenizas o compuestos no azucarados que afectan la refinación (Prabha et al., 2020).

## 2. METODOLOGÍA

### 2.1. Búsqueda bibliográfica y criterios de inclusión y exclusión.

Para la búsqueda bibliográfica se empleó una estrategia de búsqueda de información en bases de datos científicas, utilizando palabras clave en inglés y español relacionadas con el tema de estudio. Entre las principales palabras clave en inglés se incluyeron: *sugarcane*, *sugarcane juice*, *sucrose*, *near infrared spectroscopy*, *analysis*, *bagasse*, *NIR* y *Colombian*. De manera complementaria, se emplearon sus respectivas traducciones al español: *caña de azúcar*, *jugo de caña de azúcar*, *sacarosa*, *espectroscopía en el infrarrojo cercano*, *análisis*, *NIR* y *Colombia*.

Estas palabras clave se combinaron de diferentes formas, con el fin de ampliar o restringir la especificidad de los resultados y asegurar la inclusión de estudios relevantes para la industria azucarera y el uso de la técnica NIR. En cuanto al criterio temporal, se priorizó la selección de artículos publicados a partir del año 2020. No obstante, durante la revisión se incluyeron también referencias previas de carácter fundamental que aportan antecedentes teóricos o metodológicos relevantes al tema, independientemente de su año de publicación. Las bases de datos utilizadas fueron: *Google académico*, *ScienceDirect*, *Taylor and Francis*, *MDPI*, *Scopus*, entre otras.

## 3. DESARROLLO Y DISCUSIÓN

### 3.1. Fundamentos del NIRS

La espectroscopía en el infrarrojo cercano (NIR) se fundamenta en la interacción entre la radiación electromagnética y la materia, la cual induce transiciones entre los niveles de energía vibracional de las moléculas (Serrano, 2009). Estas transiciones son de baja intensidad y suelen encontrarse superpuestas o interconectadas, lo que hace necesaria la aplicación de técnicas quimiométricas para la extracción e interpretación de la información química contenida en los espectros (Chen et al., 2025). De acuerdo con el modelo del oscilador armónico, la frecuencia de vibración ( $\nu$ ) de un enlace químico depende de su constante de fuerza ( $k$ ), que refleja la rigidez del enlace, y de la masa reducida ( $\mu$ ) de los átomos que lo conforman, según la ecuación (1):

$$\nu = (1/(2\pi)) * \sqrt{(k/\mu)} \quad (1)$$

Esto implica que los enlaces más fuertes y aquellos que involucran átomos más ligeros (como O-H, N-H o C-H) presentan frecuencias de vibración más altas, característica fundamental para la interpretación espectral en la región NIR.

Las transiciones vibracionales más probables son las fundamentales ( $\nu = 0 \rightarrow \nu = 1$ ); sin embargo, también pueden ocurrir transiciones hacia niveles de energía superiores, conocidas como sobretonos, así como bandas de combinación, que corresponden a sumas o diferencias entre dos modos vibracionales. Estas últimas constituyen

la base de la espectroscopía NIR. El espectro electromagnético infrarrojo se divide, según su número de onda, en tres regiones: infrarrojo cercano (NIR: 12 800-4000  $\text{cm}^{-1}$ ), infrarrojo medio (MIR: 4000-400  $\text{cm}^{-1}$ ) e infrarrojo lejano (FIR: 400-10  $\text{cm}^{-1}$ ). En la región NIR predominan las bandas de sobretonos y de combinación, las cuales presentan intensidades débiles, anchuras considerables y, con frecuencia, superposición espectral. Esto provoca complejidad en la interpretación visual de los espectros NIR, haciendo necesario el uso de herramientas quimiométricas para la extracción e interpretación de la información química (Serrano, 2009). La espectroscopia vibracional, especialmente la espectroscopia NIR, han establecido esta herramienta por su utilidad al evaluar la calidad y seguridad del alimentaria, por los beneficios que presenta como su rapidez, no destructiva, poca o ninguna preparación de la muestra y por su sostenibilidad ambiental (Lin & Sun, 2020).

La espectroscopia NIR se basa en el principio fisicoquímico de excitar los sobretonos y las bandas de combinación de los enlaces químicos fundamentales. Si hablamos del MIR, que nos muestra las bandas fundamentales de vibración, en la espectroscopia NIR lo que ocurre son transiciones de orden superior y menor intensidad, las cuales serán detectadas, como los segundos sobretonos o las múltiples excitaciones que ocurren de manera simultánea en sus modos vibracionales (bandas de combinación). Es esta naturaleza de las transiciones en la región NIR, la que nos explica porque hay una mayor penetración de la radiación electromagnética en las muestras, permitiendo el análisis directo de sólidos con mínima preparación previa. Sin embargo, la superposición y complejidad de los espectros resultantes hacen imprescindible el uso de herramientas quimiométricas, que permiten correlacionar las señales espectrales con propiedades de interés en la caña de azúcar, tales como contenido de sacarosa, fibra y humedad, entre otras (Kassayová et al., 2025). Estos fenómenos se comprenden mejor mediante el modelo del oscilador anarmónico, el cual describe cómo el potencial vibracional molecular se desvía del comportamiento armónico ideal a medida que aumenta la energía. Como consecuencia, los sobretonos no son múltiplos exactos de la frecuencia fundamental, y su intensidad disminuye progresivamente con el orden de la transición; es decir, el primer sobretono es generalmente más intenso que el segundo, y así sucesivamente.

Dentro del concepto de anarmonicidad molecular se distinguen dos componentes fundamentales: la anarmonicidad mecánica ( $\omega_e \chi_e$ ) y la anarmonicidad eléctrica ( $\mu_2/\mu_1$ ). La anarmonicidad mecánica describe la desviación del comportamiento ideal del oscilador armónico, es decir, la diferencia entre el modelo teórico y la realidad molecular. Debido a este efecto, la frecuencia del primer sobretono ( $2\nu$ ) no corresponde exactamente al doble de la frecuencia fundamental ( $\nu$ ), sino que es ligeramente menor, reflejando la pérdida de linealidad del potencial vibracional a energías más altas. Por otro lado, la anarmonicidad eléctrica nos habla de la relación no lineal que existe entre el momento dipolar y la vibración molecular. Esto es esencial, puesto que posibilita la existencia y detección de transiciones de sobretono y bandas de combinación, lo que les da una intensidad cuantificable, aunque considerablemente más baja que la de las bandas fundamentales (Ram et al., 1986).

Un estudio realizado por (Ram et al., 1986) mostro esta capacidad de detección. En su investigación, empleando la espectroscopia NIR tuvo como objetivo la identificación de las bandas armónicas y de combinación que están asociadas al grupo N-H. En dicho estudio, los autores reportaron la asignación espectral primer ( $2\nu_1$ ) y segundo ( $3\nu_1$ ) sobretono del estiramiento N-H, localizados en las regiones de 6200  $\text{cm}^{-1}$  y 9300  $\text{cm}^{-1}$  respectivamente. No solo esto, otro de sus hallazgos fue que la formación de enlaces de hidrogeno provocó un desplazamiento batocrómico y con mayor anchura de las bandas de estiramiento N-H y C=O. Estos resultados demuestran que la espectroscopia NIR es una técnica robusta y sensible para reflejar el estado físico y químico de la muestra.

De manera complementaria, (Zhang et al., 2021)) aplicaron la espectroscopía Vis-NIR para predecir el contenido de materia orgánica del suelo (SOM). En este caso, las señales predictoras derivaron de los sobretonos y bandas de combinación de grupos funcionales como C-H, N-H y O-H, constituyentes fundamentales de la materia orgánica. Los autores emplearon un algoritmo de combinación de tres bandas (TBI), que mostró la máxima correlación con el SOM, evidenciando la alta capacidad predictiva del NIRS, especialmente al considerar relaciones entre distintas longitudes de onda en lugar de bandas aisladas. Sin embargo, el estudio también reveló

que la salinidad del suelo afectaba negativamente la precisión del modelo ( $R^2$ ), ya que las sales modifican las propiedades reflectantes del suelo, reduciendo el desempeño predictivo.

En adición a los sobretonos, que involucran la excitación reiterada de un solo modo vibracional, las bandas de combinación se expresan en frecuencias que se alinean con la suma ( $v_1 + v_2$ ), la diferencia ( $v_1 - v_2$ ) o incluso con combinaciones más sofisticadas como ( $v_1 + v_2 - v_3$ ). La presencia e intensidad de estas bandas se determinan por el acoplamiento mecánico entre los modos participantes, las limitaciones establecidas por la simetría molecular y las condiciones del ambiente químico, como la polarización provocada por el medio. Estos elementos establecen tanto la posibilidad de detectar como la aportación espectral de estas transiciones en métodos como la espectroscopía infrarroja (Gabriel Vega Barrera, 2023).

**Tabla 2.** Serie de sobretonos y su rango espectral (Gabriel Vega Barrera, 2023).

Tipo de vibración	Posición ( $\text{cm}^{-1}$ )	Longitud de onda (nm)	Intensidad relativa
Combinación	5128	1950	Fuerte (NIR)
1er sobretono	6896	1450	Moderada (NIR)
2do sobretono	10526	950	Débil (NIR)
3er sobretono	14285	700	Muy débil

### 3.1.1. Componentes de un sistema NIRS

Un sistema NIRS incluye una fuente de radiación (usualmente una lámpara de tungsteno halógena de amplio espectro, 400-2500 nm) o LEDs NIR (700-1200 nm) en aparatos portátiles (Pyroistech, 2023; Rajendran et al., 2019). El sistema de muestreo comprende sondas de fibra óptica destinadas a análisis en línea, así como celdas específicas para transmisión (líquidos) o reflectancia dispersa (sólidos). El espectrómetro puede ser disperso, FT-NIR o de filtros sintonizables, con resoluciones que oscilan entre 0.5 y 20 nm dependiendo de la disposición (Zareef et al., 2020). InGaAs (900-1700 nm) (Khan et al., 2024) y PbS (1100-2500 nm) (Edinburgh Instruments, 2023) son los detectores más habituales. La evaluación espectral necesita preprocesamiento (SNV, derivadas, MSC) y modelado multivariante (PLS, PCR, SVM), con una sólida validación (Zareef et al., 2020).

## 3.2. Aplicación de la espectroscopia NIR en el sector Sucroquímico

### 3.2.1 Parámetros de calidad del jugo de caña de azúcar

En el 2021, Sorol y colaboradores demostraron la eficacia de la espectroscopía NIR como herramienta rápida y sustentable para evaluar la calidad del jugo de caña de azúcar, eliminando la necesidad del uso de reactivos químicos y sustituyendo los métodos analíticos tradicionales, más lentos y costosos en recursos. Para ello, se implementaron modelos de calibración multivariada empleando un espectrofotómetro Foss NIRSystems modelo 6500, diseñado para muestras líquidas, equipado con un detector de transmitancia de sulfuro de plomo (PbS), lámpara de tungsteno-halógeno y un camino óptico de 1 mm, junto con el software ISIScan 2.21. El estudio analizó 3813 muestras de jugo primario de caña de azúcar recolectadas durante diferentes zafas entre 2011 y 2017. Los modelos fueron desarrollados mediante el método de los mínimos cuadrados parciales modificados (MPLS), aplicando preprocesamientos espectrales para aumentar la relación señal-ruido y corregir aberraciones derivadas de la dispersión de la luz, empleando algoritmos como SNV (*Standard Normal Variate*) y *Detrend* para eliminar tendencias curvilíneas. Gracias a este tratamiento, se logró una alta capacidad predictiva en los principales parámetros de calidad. En los análisis de °Brix, Pol y sacarosa, los coeficientes de correlación de validación (RSQ) alcanzaron valores de 0,994, 0,985 y 0,972, respectivamente, con errores estándar de predicción (SEP) de 0,134 %, 0,233 % y 0,341 %, evidenciando la alta precisión del método NIRS en la determinación de estos componentes mayoritarios. Sin embargo, el desempeño fue inferior para los azúcares reductores (glucosa y fructosa), cuyos modelos presentaron RSQ de 0,831 y 0,842, con un SEP de 0,060 % en ambos casos. Este

comportamiento se atribuyó a las bajas concentraciones de estos azúcares en las muestras y a una distribución poco homogénea de los datos. Aun así, los autores señalan que los modelos pueden emplearse como una herramienta cualitativa rápida para estimar los azúcares reductores, recomendando la inclusión de muestras con mayores concentraciones para futuras calibraciones (Sorol et al., 2021).

Por otro lado, Njume y colaboradores (2025) destacaron la relevancia del método de extracción del jugo de caña de azúcar, al demostrar que este factor puede influir significativamente en la cantidad de sólidos solubles (SSC) obtenidos, y, en consecuencia, afectar la precisión de los modelos de calibración NIRS empleados para monitorear la madurez de la caña y planificar su cosecha. En su estudio, compararon dos procedimientos de extracción: el método de extracción directa (DEM), que consiste en prensar el tallo de caña mediante una prensa hidráulica, y el método de extracción con desfibrado previo (SEM), en el cual la caña se tritura antes del prensado. Los resultados mostraron que el DEM produce un jugo con mayor contenido de SSC ( $20,04 \pm 2,40$  °Brix) en comparación con el SEM ( $19,31 \pm 1,59$  °Brix). Este comportamiento se atribuyó al desfibrado extensivo, que rompe un mayor número de células del parénquima y de los vasos del floema, liberando humedad adicional que diluye el jugo extraído. Utilizando un espectrofotómetro NIR Foss y modelos de regresión por mínimos cuadrados parciales (PLS), los autores determinaron que cada método de extracción requiere modelos de calibración específicos y optimizados en diferentes rangos espectrales para lograr una mayor precisión. En particular, el mejor modelo para el DEM se obtuvo en el rango de 1100-1850 nm, con un error cuadrático medio de predicción (RMSEP) de 0,27 °Brix y un coeficiente de determinación ( $R^2$ ) de 0,98; mientras que, para el SEM, el modelo óptimo correspondió al rango de 1850-2500 nm, con un RMSEP de 0,17 °Brix y un  $R^2$  de 0,99. Estos resultados evidencian que, al implementar la espectroscopía NIR para el control de calidad y la predicción de madurez en la caña de azúcar, es fundamental considerar el método de extracción empleado, dado que este puede afectar de manera significativa la exactitud de las mediciones basadas en los sólidos solubles (Njume et al., 2025b).

Uno de los factores que influyen en la calidad del jugo de caña de azúcar es el tipo de suelo, ya que este determina la disponibilidad de nutrientes, la capacidad de retención de agua y otras propiedades físicas y químicas que afectan el desarrollo del cultivo. La materia orgánica del suelo (MOS) es uno de los indicadores más importantes de la calidad y salud del suelo, ya que influye en propiedades como la estabilidad estructural, su capacidad de agregación, tasa de infiltración hídrica, fertilidad, su reciclabilidad de nutrientes y resistencia frente a la erosión (Santasup et al., 2024). Es por esto, que se investigó mediante la espectroscopía NIR la cuantificación rápida y precisa de carbono orgánico (Corg) y nitrógeno orgánico (Norg) en suelos agrícolas. En un estudio se analizaron 287 muestras de suelo con un espectrofotómetro NIR en el rango de 110-2500 nm mostrando resultados aceptables para el carbono orgánico. Los modelos de calibración lograron explicar entre un 75% y 80% de la variabilidad frente a los valores de referencia, con errores estándar de predicción (SEP) que varían entre 1,9 y 3,45 mg/g. Estos valores fueron considerados aceptables para el mapeo y monitoreo de la materia orgánica del suelo, y fueron optimizados cuando ajustaron la calibración en intervalos específicos de concentración, resaltando la importancia y necesidad de construir modelos adaptados a las condiciones del suelo. Sin embargo, el estudio reveló una limitación al predecir nitrógeno orgánico. Los autores atribuyen esto a irregularidades en el pretratamiento de las muestras para el análisis de referencia. Lo que demuestra que la exactitud del NIRS en su capacidad predictiva depende de la calidad y representación de los datos usados para su calibración inicial (Martin et al., 2002).

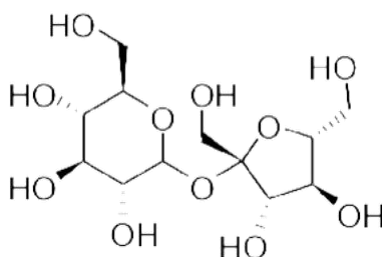
La espectroscopía NIR es un método analítico confiable que requiere un proceso de validación meticuloso. En un estudio realizado por (de Paiva et al., 2025) y colaboradores, evaluaron la capacidad predictiva de la espectroscopía NIR de un parámetro industrial crucial: los azúcares recuperables totales (TRS). En esta investigación utilizaron la cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) como método de referencia para la calibración, y poder así superar las limitaciones del método de análisis tecnológico (TA), polarimetría. El TA es usado para la cuantificación de sacarosa, pero este presenta dos inconvenientes importantes. Primero, requiere procesos complejos al momento de clarificar el jugo por medio de reactivos como el octapol. Segundo, y de gran importancia en su precisión, es un método que no es capaz de ser específico ni de cuantificar los azúcares

reductores, esto lleva a errores sistemáticos. Los resultados del estudio mostraron que el método polarimétrico subestima los valores de TRS, con un sesgo promedio de 24,75 kg/ton frente a los valores obtenidos por HPLC. Es por esto por lo que, con un total de 462 muestras correspondientes a 22 genotipos distintos, los investigadores desarrollaron modelos de calibración basados en el algoritmo de mínimos de cuadrados parciales (PLS) usando los valores de TRS obtenidos por HPLC (TRS\_LC) como referencia. El modelo fue refinado y optimizado por selección de variable espectrales usando el algoritmo de selección ordenada de predictores (OPS), que permite identificar regiones del espectro NIR con mayor poder discriminante. El modelo resultante fue el PLS-OPS mostro una capacidad predictiva robusta, con un error cuadrático medio de predicción (RMSEP) de 9.8 kg/ton y un coeficiente de correlación (R) de 0.86, lo que indica una alta concordancia entre los valores predichos y medidos. La validación del método se llevo en un contexto de mejoramiento genético. Seleccionaron un 30% de las muestras con el TRS más alto, a lo que el modelo logro identificar un 87,5% correctamente. Este alto porcentaje de eficiencia de selección confirma la precisión del modelo calibrado, para evaluaciones rápidas, económicas y con alto rendimiento, tanto en programas de selección y en control de calidad industrial.

### 3.3. Sacarosa presente en el jugo de la caña de azúcar

La sacarosa es un disacárido constituido por dos monosacáridos,  $\alpha$ -D-glucopiranososa y  $\beta$ -D-fructofuranosa, unidos a través de un enlace glicosídico  $\alpha$  (1 $\rightarrow$ 2)  $\beta$  que conecta el carbono anomérico C1 de la glucosa con el C2 de la fructosa (Figura 1). La comprensión detallada de su estructura y de la química de sus componentes resulta esencial para el estudio de la sacarosa y de los monosacáridos que la constituyen, presente en la caña de azúcar, y su comportamiento durante los procesos industriales (Karpenko et al., 2023). La estructura molecular de la sacarosa con gran cantidad de enlaces C-H y O-H, es lo que le da su huella espectral distintiva en la región del infrarrojo cercano. Son estas vibraciones moleculares las que generan bandas de absorción características actuando como una firma química, lo que permite identificarla, cuantificarla e incluso, monitorearla en tiempo real por técnicas espectroscópicas rápidas y no destructivas. La asignación espectral de estas bandas se presenta de la siguiente manera:

- A partir de los 1300 nm se pueden observar las bandas asociadas al primer sobretono y las combinaciones de vibraciones del C-H.
- A partir de los 2100 nm se encuentran las combinaciones de estiramiento y deformación de los enlaces C-O y O-H.
- Aproximadamente a 1450 nm se encuentra el primer sobretono de O-H, que se relaciona con formación de puentes de hidrogeno y humedad residual.



**Figura 1.** Estructura química de la sacarosa.

El potencial de la espectroscopia NIR en su capacidad al ofrecer análisis rápidos y confiables, es algo demostrado en una gran diversidad de estudios e investigaciones en la industria azucarera. Fue uno de estos estudios se enfoco en determinar la glucosa y fructosa en caña de azúcar in situ, comparando las predicciones de la espectroscopia NIR y los resultados obtenidos por HPLC como método de referencia. Para la construcción del modelo, los investigadores recolectaron entre 129 y 141 muestras que abarcaban diferentes variedades (como CC 85-92, CC 93-4181 y CC 93-4418), y con edades de cultivo entre los 8 meses y los 14 meses, para que el

modelo pudiese captar la variabilidad de las muestra analizadas. La calibración empleo un análisis de componentes principales (PCA) para identificar y descartar muestras atípicas, asegurando así un modelo robusto. Además, los espectros se sometieron a un pretratamiento matemático aplicando la segunda derivada, algo crucial en el NIRS, pues corrige el solapamiento de bandas espectrales y desplazamientos de la línea base. Finalmente, se desarrollo un modelo de regresión por mínimos cuadrados parciales modificados (MPLS), el modelo optimizado determino el uso de seis factores para la glucosa y nueve para la fructosa, lo que permitió incorporar la información relevante y reducir el ruido. Los resultados evidenciaron una alta correlación entre los valores obtenidos por NIRS y los medidos mediante HPLC, con un RSQ de 0.9717 y un error estándar de calibración (SEC) de 0.0681 para la glucosa, y un RSQ de 0.9965 y un SEC de 0.0229 para la fructosa. El modelo estadístico mostró una baja dispersión en los datos, confirmando la precisión, confiabilidad y rapidez del método NIRS frente a otras técnicas analíticas tradicionales (García Asprilla & Ramírez-Navas, 2018).

La espectroscopia NIR también ha demostrado una alta viabilidad para determinar el contenido de sacarosa (Pol) en jugo clarificado. En un estudio, se utilizó una sonda de fibra óptica en modo de transmitancia, contrastando los resultados con la polarimetría como método de referencia. El análisis se realizó directamente sobre el jugo clarificado, sin necesidad de preparación previa de la muestra. Se desarrolló un modelo de calibración PLS en el rango espectral de 5200-6700  $\text{cm}^{-1}$ , obteniendo un  $R^2$  de 0.936 y un error estándar de predicción (SEP) de 0.44 en la calibración y 1.89 en la validación para un conjunto de 300 muestras. Estos resultados muestran la idoneidad del NIRS al implementarlo como un sistema de monitoreo en línea, ventaja que proporciona al no tener que preparar la muestra y su compatibilidad con sistemas ópticos en planta. Pero esta precisión del modelo está limitada por la elección del método de referencia usado en la calibración. Al emplear la polarimetría, el estudio de (Tewari et al., 2003) mostro la limitación del modelo NIR, el cual no pudo discriminar la sacarosa de los azúcares reductores. Además de esto, el agua, siendo el componente mayoritario del jugo, mostro intensas bandas de absorción en la región del O-H, que pueden solapar y ocultar las señales de los analitos de interés. Para superar esta limitación, otro estudio propuso una metodología innovadora basada en la deshidratación del jugo, concentrando los analitos y eliminando la interferencia del agua. Utilizando HPLC como método de referencia y construyendo modelos PLS con selección de variables, se logró mejorar notablemente la precisión: el error cuadrático medio de predicción (RMSEP) para la sacarosa disminuyó de 12.75 mg/mL en el jugo líquido a 7.98 mg/mL en el jugo deshidratado, demostrando la eficacia de este enfoque para el análisis espectroscópico de muestras con alta humedad (Cardoso et al., 2022).

Un estudio cuyo objetivo fue la caracterización espectral y la autenticación del azúcar según su origen botánico mediante espectroscopia UV-Vis se centró en la diferenciación entre el azúcar proveniente de caña de azúcar y el derivado de remolacha azucarera. Aunque ambos contienen sacarosa químicamente idéntica, presentan huellas espectrales distintivas que no se originan en la estructura de la sacarosa, sino en la presencia de compuestos minoritarios e impurezas asociadas a la fisiología del cultivo y a los procesos industriales de refinamiento. Entre las diferencias más relevantes se identificó un mayor contenido de polisacáridos y fibra en la caña de azúcar, la presencia de rafinosa y trehalosa, así como una concentración más alta de rafinosa en la remolacha. También se observaron variaciones en los perfiles de color y en los aditivos empleados, los cuales, pese a considerarse interferencias, contribuyen a la singularidad espectral de cada origen. El análisis mostró que la región más discriminante no corresponde al infrarrojo cercano (NIR), sino al ultravioleta (UV), debido a la absorción significativa de luz por parte de los compuestos orgánicos e impurezas, lo que genera las diferencias observadas entre ambos tipos de azúcar. Asimismo, se determinó que la huella espectral está influenciada no solo por el origen botánico, sino también por el procesamiento industrial y la forma física de la sacarosa. Los modelos quimiométricos empleados, entre ellos el análisis discriminante lineal (LDA), los árboles de clasificación y regresión (CART) y los modelos de clases independientes (SIMCA), lograron una precisión del 100 % en la clasificación, destacándose el modelo LDA, que utilizó únicamente cinco longitudes de onda específicas en la región UV (230, 250, 255, 270 y 320 nm). Además, se demostró la capacidad para predecir la composición de mezclas binarias de azúcar de caña y remolacha, siendo el modelo de regresión lineal múltiple (MLR) el más robusto y aplicable, al

emplear la primera derivada de Savitzky-Golay y seleccionar solo seis longitudes de onda en el UV, con un RMSEP de 3,28 % y un RPD de 9,46, lo que confirma su elevada capacidad predictiva y su potencial utilidad en la autenticación de azúcares comerciales (Eriklioglu et al., 2023).

### 3.4. CAÑA DE AZÚCAR COMO BIOMATERIAL

El bagazo de caña de azúcar, compuesto principalmente por celulosa (40-50%), hemicelulosa (25-30%) y lignina (20-25%), es un material heterogéneo cuya composición varía según la variedad de caña, las condiciones de cultivo y la eficiencia del proceso de molienda (Pandey et al., 2000). La espectroscopía NIRS permite caracterizar su composición de manera rápida y no destructiva mediante modelos de calibración multivariada, facilitando la selección de bagazos con propiedades adecuadas para distintos bioprocesos (Posom et al., 2022), (Chidhananda & Navaneeth, 2022). Tradicionalmente, el bagazo se utiliza como biocombustible en la cogeneración de energía dentro de los ingenios azucareros; sin embargo, su aprovechamiento se ha expandido hacia aplicaciones de mayor valor agregado. Por ejemplo, la ceniza de bagazo de caña (CBCA), obtenida mediante su combustión controlada, se emplea como aditivo puzolánico para la estabilización de suelos y en la fabricación de materiales de construcción sostenibles. La eficiencia de estos subproductos depende en gran medida de la variabilidad del bagazo y de factores asociados al posprocesamiento, siendo la temperatura de combustión un parámetro crítico en la calidad y reactividad de la CBCA (Millones-Chapoñan et al., 2023). Además, el bagazo de caña puede destinarse a otras aplicaciones como:

- Generación de energía renovable: Combustión directa en calderas para producir vapor y electricidad, cubriendo hasta el 30% de la demanda energética de los ingenios (Arshad & Ahmed, 2016).
- Materiales compuestos: fabricación de bioplásticos, cementos, fibras textiles, entre otros (Chidhananda & Navaneeth, 2022; Singh Rawat & Sharma, 2023).
- Agricultura: Como sustrato para compostaje (Lu et al., 2024).

El uso eficiente del bagazo de caña de azúcar depende en gran medida de una caracterización precisa de su estructura lignocelulósica. Diversos estudios han demostrado que la lignina actúa como una barrera protectora frente a la celulosa, dificultando su hidrólisis; por ello, es necesario aplicar ciertos pretratamientos que modifiquen la matriz y faciliten su degradación. Tradicionalmente, la caracterización del bagazo y la evaluación de dichos pretratamientos se han realizado mediante métodos químicos y enzimáticos, los cuales, si bien son altamente precisos y considerados de referencia, presentan desventajas importantes: suelen ser destructivos, demandan tiempo y recursos, y el uso de reactivos implica un impacto ambiental negativo (Asgher et al., 2013). Estos casos evidencian la necesidad de contar con métodos de análisis rápidos y confiables. En procesos como la cogeneración, donde el bagazo se utiliza como combustible, resulta esencial controlar parámetros como el contenido de humedad (MC) y el poder calorífico (HV), ya que influyen directamente en la eficiencia de la combustión. Los métodos tradicionales, como la calorimetría o el secado en horno, aunque precisos, son lentos y poco prácticos para un monitoreo en tiempo real. La implementación de la espectroscopía NIR requiere diseños experimentales rigurosos y un tratamiento quimiométrico avanzado de los datos. Estudios realizados con bagazo han demostrado que esta técnica puede predecir el contenido de humedad con alta precisión ( $R^2p = 0.90$ ), suficiente para su aplicación operativa, aunque la predicción del poder calorífico presenta menor exactitud ( $R^2p = 0.71$ ). Por ello, es necesario establecer expectativas diferenciadas según el parámetro a analizar y la finalidad del uso del NIRS. (Posom et al., 2022).

Caracterizar el contenido fibroso de la caña de azúcar es un paso fundamental para optimizar su aprovechamiento en biorrefinerías y en la producción de bioenergía. Sus principales componentes, celulosa, hemicelulosa y lignina se determinan tradicionalmente mediante el método de Van Soest, un procedimiento químico húmedo que emplea reactivos detergentes para fraccionar la pared celular en sus distintos componentes. Sin embargo, estudios en materiales lignocelulósicos similares, como el bambú, han demostrado la alta eficacia de la espectroscopía NIR

como alternativa rápida y no destructiva. En dichos estudios, se desarrollaron modelos de calibración no lineales (LS-SVM) basados en longitudes de onda seleccionadas mediante algoritmos de proyección sucesiva (SPA), logrando predecir los contenidos de hemicelulosa, lignina y celulosa con coeficientes de determinación ( $R^2_p$ ) superiores a 0.82 y una desviación predictiva residual mayor a 2.3, evidenciando el potencial del NIRS para estimar el contenido fibroso. Este potencial se fundamenta en la detección de sobretonos y bandas de combinación asociadas a los grupos funcionales característicos de estos biopolímeros, con bandas clave ubicadas entre 1420-1600 nm (primer sobretono del estiramiento O-H de celulosa y hemicelulosa), alrededor de 2100 nm (combinación de estiramientos O-H y C-H), y entre 2270-2330 nm (combinaciones de C-O y vibraciones de C-H relacionadas con los polisacáridos) (Li et al., 2015). La cuantificación de estos componentes en el NIRS de forma rápida y sin mayor preparación permite que se pueda clasificar el bagazo de la manera más eficiente para su uso en producción de combustibles, o también para extraer lignina para usarla como aditivo prebiótico en alimentación animal. La lignina, que es un polímero aromático complejo, hace de su firma espectral única y permite que sea cuantificable por medio de modelos quimiométricos avanzados (Fangueiro et al., 2023).

#### **4. CONCLUSIONES**

La caña de azúcar representa un pilar fundamental del sector agrícola colombiano y una de las principales bases de su economía, destacándose no solo por la producción de sacarosa, sino también por su contenido fibroso y su potencial como biomaterial. En la industria azucarera, su análisis y procesamiento se realizan mediante métodos tradicionales de química húmeda o técnicas instrumentales que, si bien son precisas, requieren una preparación exhaustiva de las muestras, el uso de reactivos químicos y personal especializado, lo que incrementa los costos y el tiempo de análisis, además de generar impactos ambientales negativos. A esto se suman los múltiples factores que influyen en la calidad de la caña, como las condiciones climáticas, la variedad genética, la fisiología del cultivo, la disponibilidad de nutrientes, el manejo del suelo y del riego, entre otros, que afectan su composición desde el campo hasta el procesamiento industrial, dificultando el control de calidad mediante métodos convencionales. En este contexto, la espectroscopia en el infrarrojo cercano (NIR) surge como una alternativa analítica poderosa y sostenible. Esta técnica permite realizar mediciones rápidas, no destructivas y sin necesidad de reactivos, tanto en laboratorio como directamente en campo, facilitando el monitoreo de parámetros clave a lo largo de toda la cadena productiva. La alta eficacia predictiva del NIRS en el control de calidad de parámetros como Brix, Pol o TRS mostro altos valores en sus coeficiente de determinación en las diferentes investigaciones citadas, y con modelos bien calibrados, lo que permite monitores de la madurez y la calidad de la caña en campo optimizando el control de su cosecha. También es una técnica confiable en la industria por su capacidad para medir su contenido de fibra y humedad, pues la precisión al predecir estos parámetros permite la optimización en la molienda, y asegura la calidad del bagazo como combustible. Asimismo, la evaluación del suelo agrícola, la espectroscopia NIR muestra un gran potencial al diagnosticar propiedades químicas del suelo como el pH y la materia orgánica. No obstante, su eficacia depende de la calidad de los modelos de calibración empleados, los cuales deben construirse a partir de bases de datos robustas y representativas, y mantenerse actualizados para garantizar precisión y confiabilidad frente a los métodos de referencia. En conclusión, la espectroscopia NIR se consolida como una herramienta versátil, eficiente y ambientalmente amigable para el análisis integral de la caña de azúcar en todas sus etapas, siempre que se gestione adecuadamente la calibración y validación de sus modelos predictivos.

#### **5. AGRADECIMIENTOS**

Agradezco a mi madre Ross Jackeline Sierra y a mi padre Alejandro Davalos por todo su apoyo, por lo que soy como persona. A mi hermano Daniel Davalos Sierra y mi abuela Rosa Mejía por apoyarme con amor. A mis tutores Julieth Orduña y Jorge Mora por instruirme y capacitarme en la realización de este trabajo. Y finalmente, a la

Universidad Santiago de Cali y su cuerpo de docentes, por brindarme todas las herramientas y el conocimiento adquirido que me llevo al crecimiento profesional y académico.

## 6. DECLARACION DEL USO DE INTELIGENCIA ARTIFICIAL

Los autores declaran que no han usado herramientas de inteligencia artificial (IA) en la creación de este artículo

## 7. CONFLICTO DE INTERESES

Los autores declaran que no tienen conflicto de intereses

## 8. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Arshad, M., & Ahmed, S. (2016). Cogeneration through bagasse: A renewable strategy to meet the future energy needs. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 54, 732-737. <https://doi.org/10.1016/J.RSER.2015.10.145>
- Asgher, M., Ahmad, Z., & Iqbal, H. M. N. (2013). Alkali and enzymatic delignification of sugarcane bagasse to expose cellulose polymers for saccharification and bio-ethanol production. *Industrial Crops and Products*, 44, 488-495. <https://doi.org/10.1016/J.INDCROP.2012.10.005>
- Assunção, J. C. C., Machado, L. L., Lemos, T. L. G., Cordell, G. A., & Monte, F. J. Q. (2008). Sugar cane juice for the bioreduction of carbonyl compounds. *Journal of Molecular Catalysis B: Enzymatic*, 52-53(1-4), 194-198. <https://doi.org/10.1016/J.MOLCATB.2008.01.004>
- Cardoso, W. J., Gomes, J. G. R., Roque, J. V., Barbosa, M. H. P., & Teófilo, R. F. (2022). Dehydration as a Tool to improve predictability of sugarcane juice carbohydrates using near-infrared spectroscopy based PLS models. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 220, 104459. <https://doi.org/10.1016/J.CHEMOLAB.2021.104459>
- Chen, Y., Gao, R., Xiang, J., Lin, Z., Chen, C., & Yu, W. (2025). Progress of near infrared spectroscopy in tea research. *Food Chemistry*, 487, 144691. <https://doi.org/10.1016/J.FOODCHEM.2025.144691>
- Chidhananda, R. S., & Navaneeth, B. (2022). Fabrication and testing of bagasse and coir fibre reinforced composite material. *Materials Today: Proceedings*, 54, 179-186. <https://doi.org/10.1016/J.MATPR.2021.08.208>
- de Paiva, J. C., Junior Cardoso, W., de Oliveira Filho, H. R., Pereira Barbosa, M. H., Peternelli, L. A., & Teófilo, R. F. (2025). Enhanced Total Recoverable Sugar (TRS) Estimation in Sugar Cane Juice by HPLC and Rapid TRS Prediction via NIR Spectroscopy Coupled with Partial Least-Squares Modeling. *ACS Food Science and Technology*, 5(8), 3169-3179. <https://doi.org/10.1021/acsfoodscitech.5c00485>
- Delgadillo-Duran, D. A., Vargas-García, C. A., Varón-Ramírez, V. M., Calderón, F., Montenegro, A. C., & Reyes-Herrera, P. H. (2022). Vis-NIR spectroscopy and machine learning methods to diagnose chemical properties in Colombian sugarcane soils. *Geoderma Regional*, 31, e00588. <https://doi.org/10.1016/J.GEODRS.2022.E00588>
- Edinburgh Instruments. (2023, December 11). *NIR Emission Spectra of PbS Quantum Dots Using the FS5 Spectrofluorometer*. <https://www.edinst.com/resource/application-note-nir-emission-spectra-of-pbs-quantum-dots-using-the-fs5-spectrofluorometer/>
- Eriklioglu, H., Ilhan, E., Khodasevich, M., Korolko, D., Manley, M., Castillo, R., & Oztop, M. H. (2023). Classification and quantification of sucrose from sugar beet and sugarcane using optical spectroscopy and chemometrics. *Journal of Food Science*, 88(8), 3274-3286. <https://doi.org/10.1111/1750-3841.16674>
- Fangueiro, J. F., de Carvalho, N. M., Antunes, F., Mota, I. F., Pintado, M. E., Madureira, A. R., & Costa, P. S. (2023). Lignin from sugarcane bagasse as a prebiotic additive for poultry feed. *International Journal of Biological Macromolecules*, 239(January). <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2023.124262>
- Gabriel Vega Barrera. (2023, February 28). *Bandas de Absorción NIR*. <https://www.linkedin.com/pulse/bandas-de-absorción-nir-gabriel-antonio-vega-barrera/>
- García Asprilla, I. D. S., & Ramírez-Navas, J. S. (2018). Near-infrared spectroscopy: A rapid alternative technique to reducing sugars determination in juice of sugarcane (*Saccharum officinarum* L.). *Journal of Pharmacy and Pharmacognosy Research*, 6(5), 392-401. [https://doi.org/10.56499/jppres18.374\\_6.5.392](https://doi.org/10.56499/jppres18.374_6.5.392)
- Kassayová, M., Jiménez-Redondo, M., Sarka, J., Dohnal, P., Glosik, J., Caselli, P., & Jusko, P. (2025). Rovibrational overtone and combination bands of the HCNH<sup>+</sup> ion. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 337, 126040. <https://doi.org/10.1016/J.SAA.2025.126040>
- Khan, H. H., Pu, Y., McCarthy, U., Casey, I., & O'Shea, N. (2024). Quantification of macro-components in raw milk using

- micro NIR sensors. *Journal of Food Composition and Analysis*, 133, 106423. <https://doi.org/10.1016/J.JFCA.2024.106423>
- Li, X., Sun, C., Zhou, B., & He, Y. (2015). Determination of Hemicellulose, Cellulose and Lignin in Moso Bamboo by Near Infrared Spectroscopy. *Scientific Reports 2015 5:1*, 5(1), 1-11. <https://doi.org/10.1038/SREP17210>
- Lin, X., & Sun, D. W. (2020). Recent developments in vibrational spectroscopic techniques for tea quality and safety analyses. *Trends in Food Science & Technology*, 104, 163-176. <https://doi.org/10.1016/J.TIFS.2020.06.009>
- Lu, M., Lin, B., Zhang, Y., Hao, Y., Li, K., Huang, Z., & Li, J. (2024). Insight into the molecular transformation pathways of humic acid in the co-composting of bagasse and cow manure after adding compound microorganisms. *Process Biochemistry*, 143, 23-33. <https://doi.org/10.1016/J.PROCBIO.2024.04.029>
- Martin, P. D., Malley, D. F., Manning, G., & Fuller, L. (2002). Determination of soil organic carbon and nitrogen at the field level using near-infrared spectroscopy. *Canadian Journal of Soil Science*, 82(4), 413-422. <https://doi.org/10.4141/S01-054>
- Meng, Y., Lan, Q., Qin, J., Yu, S., Pang, H., & Zheng, K. (2019). Data-driven soft sensor modeling based on twin support vector regression for cane sugar crystallization. *Journal of Food Engineering*, 241, 159-165. <https://doi.org/10.1016/J.JFOODENG.2018.07.035>
- Millones-Chapoñan, M., Muñoz-Pérez, S. P., Villanueva-Meza, C. D., Millones-Chapoñan, M., Muñoz-Pérez, S. P., & Villanueva-Meza, C. D. (2023). La Ceniza de Bagazo de Caña de Azúcar Como Aditivo Estabilizador en Suelos Arcillosos con Fines de Pavimentación: Una Revisión Literaria. *Ingeniería y Competitividad*, 25(1). <https://doi.org/10.25100/IYC.V25I1.11801>
- Moncada, J., El-Halwagi, M. M., & Cardona, C. A. (2013). Techno-economic analysis for a sugarcane biorefinery: Colombian case. *Bioresource Technology*, 135, 533-543. <https://doi.org/10.1016/J.BIORTECH.2012.08.137>
- Njume, A. C., Naomasa, Y., Shinzato, Y., Mitsuoka, M., & Taira, E. (2025a). Laboratory analysis of soluble solids content in sugarcane juice from direct and shredded extraction methods using NIR spectrometer. *Journal of Food Composition and Analysis*, 138, 107009. <https://doi.org/10.1016/J.JFCA.2024.107009>
- Njume, A. C., Naomasa, Y., Shinzato, Y., Mitsuoka, M., & Taira, E. (2025b). Laboratory analysis of soluble solids content in sugarcane juice from direct and shredded extraction methods using NIR spectrometer. *Journal of Food Composition and Analysis*, 138, 107009. <https://doi.org/10.1016/J.JFCA.2024.107009>
- Pandey, A., Soccol, C. R., Nigam, P., & Soccol, V. T. (2000). Biotechnological potential of agro-industrial residues. I: sugarcane bagasse. *Bioresource Technology*, 74(1), 69-80. [https://doi.org/10.1016/S0960-8524\(99\)00142-X](https://doi.org/10.1016/S0960-8524(99)00142-X)
- Pasquini, C. (2018). Near infrared spectroscopy: A mature analytical technique with new perspectives – A review. *Analytica Chimica Acta*, 1026, 8-36. <https://doi.org/10.1016/J.ACA.2018.04.004>
- Phuphaphud, A., Saengprachatanarug, K., Posom, J., Maraphum, K., & Taira, E. (2020). Non-destructive and rapid measurement of sugar content in growing cane stalks for breeding programmes using visible-near infrared spectroscopy. *Biosystems Engineering*, 197, 76-90. <https://doi.org/10.1016/J.BIOSYSTEMSENG.2020.06.012>
- Posom, J., Phuphaphud, A., Saengprachatanarug, K., Maraphum, K., Saijan, S., Pongkan, K., & Srimai, K. (2022). Real-time measuring energy characteristics of cane bagasse using NIR spectroscopy. *Sensing and Bio-Sensing Research*, 38, 100519. <https://doi.org/10.1016/J.SBSR.2022.100519>
- Prabha, S., Durgalakshmi, D., Rajendran, S., & Lichtfouse, E. (2020). Plant-derived silica nanoparticles and composites for biosensors, bioimaging, drug delivery and supercapacitors: a review. *Environmental Chemistry Letters 2020 19:2*, 19(2), 1667-1691. <https://doi.org/10.1007/S10311-020-01123-5>
- Pyroistech. (2023, January 29). *Fuentes en el infrarrojo para investigadores*. <https://www.pyroistech.com/es/fuentes-infrarrojo-investigadores/>
- Rajendran, V., Chang, H., & Liu, R. S. (2019). Recent progress on broadband near-infrared phosphors-converted light emitting diodes for future miniature spectrometers. *Optical Materials: X*, 1. <https://doi.org/10.1016/J.OMX.2019.100011>
- Ram, S., Lamba, O. P., & Yadav, J. S. (1986). The identification and origin of N-H group overtone and combination bands in the near infrared spectra of 2-thiopyrrole-1,2-dicarboximides. *Proceedings of the Indian Academy of Sciences - Chemical Sciences*, 96(1-2), 73-83. <https://doi.org/10.1007/BF02863299>
- Santasup, N., Theanjumol, P., Santasup, C., Kittiwachana, S., Mawan, N., Prantong, L., & Khongdee, N. (2024). Development of near-infrared spectroscopy (NIRS) for estimating organic matter, total carbon, and total nitrogen in agricultural soil. *MethodsX*, 13, 102798. <https://doi.org/10.1016/J.MEX.2024.102798>
- Serrano, J. L. (2009). Espectroscopía infrarroja 1-Fundamentos. *Instrumentación y Métodos de Análisis Químico*, 35.
- Sica, P., de Castro Mattos, E., Silveira, G. M., Abdalla, J. P., Alves, V. K., Borges, I. S., Landell, M., Xavier, M. A., & Baptista, A. S. (2023). Quantitative and qualitative evaluation of novel energy cane accessions for sugar, bioenergy, 1 G, and 2 G ethanol production. *Industrial Crops and Products*, 203, 117163. <https://doi.org/10.1016/J.INDCROP.2023.117163>

- Singh Rawat, S., & Sharma, A. (2023). Sugarcane bagasse ash—The future composite material: A literature review. *Materials Today: Proceedings*. <https://doi.org/10.1016/J.MATPR.2023.07.272>
- Sorol, N., Arancibia, E., Bortolato, S. A., & Olivieri, A. C. (2010). Visible/near infrared-partial least-squares analysis of Brix in sugar cane juice: A test field for variable selection methods. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, *102*(2), 100-109. <https://doi.org/10.1016/J.CHEMOLAB.2010.04.009>
- Sorol, N., Zossi, S., Juarez, B., Diez, P., Medina, S., & Ruiz, M. (2021). Espectroscopía NIRS en el estudio de calidad de caña de azúcar Parte I: Correlaciones para Brix, Pol, Sacarosa, Glucosa y Fructosa. *Revista Industrial y Agrícola de Tucumán*, *Tomo 98* (1(1)), 61-66.
- Tewari, J., Mehrotra, R., & Irudayaraj, J. (2003). Direct near infrared analysis of sugar cane clear juice using a fibre-optic transmittance probe. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, *11*(5), 351-356. <https://doi.org/10.1255/JNIRS.386>
- Zareef, M., Chen, Q., Hassan, M. M., Arslan, M., Hashim, M. M., Ahmad, W., Kutsanedzie, F. Y. H., & Agyekum, A. A. (2020). An Overview on the Applications of Typical Non-linear Algorithms Coupled With NIR Spectroscopy in Food Analysis. *Food Engineering Reviews*, *12*(2), 173-190. <https://doi.org/10.1007/s12393-020-09210-7>
- Zhang, Z., Ding, J., Zhu, C., Wang, J., Ma, G., Ge, X., Li, Z., & Han, L. (2021). Strategies for the efficient estimation of soil organic matter in salt-affected soils through Vis-NIR spectroscopy: Optimal band combination algorithm and spectral degradation. *Geoderma*, *382*, 114729. <https://doi.org/10.1016/J.GEODERMA.2020.114729>
- Babeker, A. M., & Mastafa, G. A. (2020). EVALUATION THE QUALITY PARAMETERS OF SUGAR CANE AND RAW SUGAR. *European Journal of Food Science and Technology*, *8*(1), 55-71.
- Karpenko, M. Y., Abronina, P. I., Zinin, A. I., Chizhov, A. O., & Kononov, L. O. (2023). TIPS group-assisted isomerization of benzyl protected d-manno- and d-glucopyranose to d-fructofuranose derivatives. *Carbohydrate Research*, *534*, 108942. <https://doi.org/10.1016/J.CARRES.2023.108942>
- Lima, S. L. T., Mello, C., & Poppi, R. J. (2005). PLS pruning: a new approach to variable selection for multivariate calibration based on Hessian matrix of errors. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, *76*(1), 73-78. <https://doi.org/10.1016/J.CHEMOLAB.2004.09.007>
- Babeker, A. M., & Mastafa, G. A. (2020). EVALUATION THE QUALITY PARAMETERS OF SUGAR CANE AND RAW SUGAR. *European Journal of Food Science and Technology*, *8*(1), 55-71.