

Prediction of Olive Chemical Characteristics by FT-NIR Spectroscopy

Cristina Alamprese^{1*}, Olusola Samuel Jolayemi¹, Silvia Grassi¹, Ernestina Casiraghi¹

¹Department of Food, Environmental and Nutritional Sciences (DeFENS), Università degli Studi di Milano, via G. Celoria 2, 20133 Milan, Italy, cristina.alamprese@unimi.it, olusola.jolayemi@unimi.it, silvia.grassi@unimi.it, ernestina.casiraghi@unimi.it

Chemical characteristics of olive fruits change during the ripening period and definitely affect the quality of the oil. A rapid and nondestructive method for predicting these characteristics is of paramount importance for the quality design of the end product. However, spectroscopic determination of quality parameters in intact olives is less frequent than other fruits (Fernández-Espinosa, 2016). Thus, this work aimed at predicting water, oil, and total polyphenol content (TPC) for different cultivars of olives by means of FT-NIR spectroscopy.

In particular, 267 olive samples belonging to 13 different cultivars and collected during three harvesting years were analysed in diffuse reflectance by an FT-NIR spectrometer (12,500–3,600 cm^{-1} ; 8 cm^{-1} resolution; 32 scans). Samples were analysed as single olives (20 olives per sample) by a fibre optic probe and as aliquots (100 g each) by an integrating sphere (2 aliquots per sample). Chemical analyses were performed as reported by Trapani et al. (2016). Spectra were sample-based averaged and pretreated to develop PLS regression models validated both by cross-validation and external prediction (30% of samples selected by Kennard-Stone algorithm).

Moisture, oil, and TPC content ranges were 39.5–85.3%, 2.1–26.0%, and 2.5–60.6 g/kg, respectively. Good PLS models were obtained for all the chemical parameters, with prediction R^2 ranging from 0.78 to 0.84 and maximum RMSEP values of 4.3%, 3.0%, and 8.5 g/kg for moisture, oil, and TPC, respectively. Similar results were obtained for both of the sample presentation forms, suggesting applicability of FT-NIR spectroscopy for chemical characterization of olive fruits both in-field and on-line.

Keywords: water content, oil content, polyphenols, PLS models

Acknowledgements: This work has been supported by the AGER 2 Project (Grant n° 2016-0105). Authors wish to thank the research unit of University of Bari, Teramo, Reggio Calabria, and Sassari for the assessment of the chemical properties.

REFERENCES

- Fernández-Espinosa, A. J., 2016. Combining PLS regression with portable NIR spectroscopy to on-line monitor quality parameters in intact olives for determining optimal harvesting time. *Talanta* 148, 216–228. <http://dx.doi.org/10.1016/j.talanta.2015.10.084>.
- Trapani, S., Migliorini, M., Cherubini, C., Cecchi, L., Canuti, V., Fia, G., & Zanoni, B., 2016. Direct quantitative indices for ripening of olive oil fruits to predict harvest time. *European Journal of Lipid Science and Technology*, 118, 1202 – 1212. <https://dx.doi.org/10.1002/ejlt.201500317>

DOI: <https://doi.org/10.5281/zenodo.4549236>

Predizione delle Caratteristiche Compositive di Olive mediante Spettroscopia FT-NIR

Cristina Alamprese^{1*}, Olusola Samuel Jolayemi¹, Silvia Grassi¹, Ernestina Casiraghi¹

¹Dipartimento di Scienze per gli Alimenti, la Nutrizione e l'Ambiente (DeFENS), Università degli Studi di Milano, via G. Celoria 2, 20133 Milano, Italia; cristina.alamprese@unimi.it; olusola.jolayemi@unimi.it; silvia.grassi@unimi.it; ernestina.casiraghi@unimi.it

Le caratteristiche compositive delle olive si modificano durante la maturazione, comportando un effetto diretto sulla qualità degli oli ottenuti. Un metodo rapido e non distruttivo per la predizione di queste caratteristiche è quindi fondamentale per il settore oleario. Tuttavia, l'applicazione della spettroscopia per la determinazione dei parametri qualitativi delle olive intatte è meno frequente rispetto ad altri frutti (Fernández-Espinosa, 2016). In questo contesto, il presente studio propone di valutare la possibilità di predire attraverso spettroscopia FT-NIR il contenuto in acqua, olio e polifenoli totali in olive di diverse cultivar.

In particolare, 267 campioni di olive appartenenti a 13 cultivar e raccolte in 3 anni di campagna sono state analizzate in riflettanza diffusa mediante spettrometro FT-NIR (12500-3600 cm^{-1} ; risoluzione 8 cm^{-1} ; 32 scansioni). I campioni sono stati analizzati sia come singole olive (20 per campione) mediante fibra ottica, sia in aliquote (2 da 100 g ciascuna) utilizzando una sfera integratrice. Le analisi chimiche sono state svolte come riportato da Trapani et al. (2016). Gli spettri sono stati mediati per campione, pretrattati e utilizzati per lo sviluppo di modelli di regressione PLS validati sia mediante cross-validazione che in predizione esterna selezionando il 30% dei campioni applicando l'algoritmo Kennard-Stone.

Gli intervalli di variazione dei contenuti in acqua, olio e polifenoli sono risultati 39.5-85.3%, 2.1-26.0% e 2.5-60.6 g/kg, rispettivamente. Si sono ottenuti buoni modelli PLS, con R^2 in predizione compreso tra 0.78 e 0.84 e RMSEP inferiori a 4.3%, 3.0% e 8.5 g/kg rispettivamente per il contenuto in acqua, olio e polifenoli. Per entrambe le tecniche di campionamento si sono ottenuti risultati confrontabili, suggerendo l'applicabilità dell'approccio per la caratterizzazione delle olive sia in campo che in frantoio.

Parole chiave: contenuto di acqua, contenuto di olio, polifenoli, modelli PLS.

Ringraziamenti: Il lavoro è stato supportato dal progetto AGER 2 (Grant n° 2016-0105). Gli Autori ringraziano le unità operative delle Università di Bari, Teramo, Reggio Calabria e Sassari per la determinazione dei parametri chimici.

RIFERIMENTI

- Fernández-Espinosa, A. J., 2016. Combining PLS regression with portable NIR spectroscopy to on-line monitor quality parameters in intact olives for determining optimal harvesting time. *Talanta* 148, 216-228. <http://dx.doi.org/10.1016/j.talanta.2015.10.084>.
- Trapani, S., Migliorini, M., Cherubini, C., Cecchi, L., Canuti, V., Fia, G., & Zanoni, B., 2016. Direct quantitative indices for ripening of olive oil fruits to predict harvest time. *European Journal of Lipid Science and Technology*, 118, 1202 - 1212. <https://dx.doi.org/10.1002/ejlt.201500317>