



Silvia Grassi

FT-NIR spectroscopy for vinegar adulteration assessment

Silvia Grassi^{1*}, Cristina Alamprese¹

¹DeFENS Department of Food, Environmental and Nutritional Sciences,
Università degli Studi di Milano – Italy, silvia.grassi@unimi.it, cristina.alamprese@unimi.it

*Corresponding author

Vinegar is one of the food products most subjected to different types of frauds (Callejon et al., 2018). The most common fraud has a commercial character and it consists in the addition of a less economically valuable product, such as spirit vinegar, to authentic grape or apple vinegar. It is undoubtful that the detection of commercial frauds calls for non-destructive, rapid, and reliable fingerprint techniques such as NIR spectroscopy.

In this framework, the work aims at determining the adulteration of grape vinegars with spirit vinegar by NIR spectroscopy. For this purpose, 4 white grape vinegars were adulterated with 2 different spirit vinegars from 5% to 25% (v/v), at 5% interval. Further 16 grape vinegars were considered to enlarge the authentic product dataset. Spectra (12500-4500 cm^{-1}) of two aliquots of each samples were collected in duplicate by a Fourier-transform Near-Infrared (FT-NIR) spectrometer (MPA, Bruker) equipped with a 2 mm glass cuvette.

Replicated spectra of each sample were averaged, pre-treated and explored by Principal Component Analysis (PCA). After variable selection ($n=15$) by SELECT algorithm, Linear Discriminant Analysis (LDA) was performed by V-PARVUS. The two-class model, to classify samples into authentic and adulterated, was validated both in cross validation (5CV) and in prediction by an external test set randomly created.

The LDA model gave 100% of correct classification rate in calibration (70 samples), cross-validation and prediction (40 samples), thus overcoming the classification rates obtained by other spectroscopic methods (i.e., UV-Vis and FT-IR) (Cavdaroglu and Ozen, 2022).

The proposed approach demonstrated to be a valid tool in vinegar authentication, suitable to assess the fraudulent behaviors, thus guaranteeing stakeholders' rights.

Keywords: vinegar, authentication, Linear Discriminant Analysis

REFERENCES

- Callejon, R. M., Rios-Reina, R. Morales, M. L., Troncoso, A. M. Thomas, F., & Camin, F. (2018). Vinegar. In J. F. Morin, & M. Lees (Eds.), *Food Integrity Handbook. A Guide to Food Authenticity Issues and Analytical Solutions* (pp. 273–293). Eurofins Analytics France: Nantes, France.
- Cavdaroglu, C., & Ozen, B. (2022). Detection of vinegar adulteration with spirit vinegar and acetic acid using UV-visible and Fourier transform infrared spectroscopy. *Food Chemistry*, 132150.



Silvia Grassi

Spettroscopia FT-NIR per l'autenticazione dell'aceto

Silvia Grassi^{1*}, Cristina Alamprese¹

¹DeFENS Department of Food, Environmental and Nutritional Sciences,
Università degli Studi di Milano – Italy, silvia.grassi@unimi.it, cristina.alamprese@unimi.it

*Corresponding author

L'aceto è uno dei prodotti alimentari più soggetti a frode (Callejon et al., 2018), soprattutto di natura commerciale. La frode più comune consiste infatti nell'aggiungere ad aceti di mela o vino prodotti di minor valore, come l'aceto di alcol. Va da sé che l'individuazione di frodi commerciali richiama l'utilizzo di tecniche non distruttive, rapide e affidabili come la spettroscopia NIR.

In questo contesto, il lavoro si prefigge di sviluppare un metodo di spettroscopia NIR per individuare l'adulterazione di aceto di vino. A questo scopo, 4 aceti di vino bianco sono stati miscelati con 2 differenti aceti bianchi di alcol considerando percentuali di adulterazione dal 5 al 25% (v/v), ad intervalli del 5%. Inoltre, il dataset degli aceti di vino bianco è stato incrementato considerando altri 16 campioni commerciali. Gli spettri (12500-4500 cm⁻¹) di due aliquote per ciascun campione sono stati raccolti in doppio mediante uno spettrometro FT-NIR (MPA, Bruker) utilizzando una cuvetta in vetro da 2 mm.

Gli spettri replicati sono stati mediati, pretrattati ed esplorati mediante Analisi delle Componenti Principali (PCA). Dopo un'opportuna selezione di variabili (n=15) utilizzando l'algoritmo SELECT, si è sviluppato un modello di classificazione LDA (Analisi Discriminante Lineare) per discriminare i campioni autentici da quelli adulterati. I modelli di classificazione a due classi sono stati validati internamente (cross-validazione con 5 gruppi di cancellazione) ed esternamente. L'analisi dei dati è stata effettuata grazie all'utilizzo del software V-PARVUS.

I modelli LDA hanno permesso di classificare correttamente il 100% dei campioni in calibrazione (n=70), cross-validazione e predizione (n=40), migliorando quanto già ottenuto dall'applicazione di altre tecniche spettroscopiche (UV-Vis e FT-IR) (Cavdaroglu and Ozen, 2022).

In conclusione, l'approccio proposto si è dimostrato un valido strumento per la rapida autenticazione di aceto di vino, fondamentale per individuare comportamenti fraudolenti al fine di garantire i diritti di tutti gli attori della filiera.

Parole chiave: aceto, autenticazione, Analisi Discriminante Lineare

Riferimenti bibliografici:

Callejon, R. M., Rios-Reina, R. Morales, M. L., Troncoso, A. M. Thomas, F., & Camin, F. (2018). Vinegar. In J. F. Morin, & M. Lees (Eds.), *Food Integrity Handbook. A Guide to Food Authenticity Issues and Analytical Solutions* (pp. 273–293). Eurofins Analytics France: Nantes, France.

Cavdaroglu, C., & Ozen, B. (2022). Detection of vinegar adulteration with spirit vinegar and acetic acid using UV-visible and Fourier transform infrared spectroscopy. *Food Chemistry*, 132150