



Application Note AN-NIR-111

Valor de yodo, FFA, índice de refracción y composición de ácidos grasos con NIRS

Análisis multiparamétrico de aceites comestibles en pocos segundos

Los aceites comestibles son esenciales para nuestra dieta. Se utilizan varios parámetros para evaluar la calidad del aceite, incluida la determinación del valor de yodo, los ácidos grasos libres (FFA), el índice de refracción y la composición de ácidos grasos. El análisis de la composición de ácidos grasos

proporciona una visión detallada de la concentración de diferentes ácidos grasos presentes en el aceite. El contenido de ácido linoleico esencial (C18:2) y ácido alfa-linolénico (C18:3) es especialmente interesante para los productores de aceites comestibles. Las técnicas de análisis tradicionales, como la

titulación o la cromatografía de gases, pueden consumir mucho tiempo y a menudo requieren el uso de disolventes peligrosos que pueden suponer riesgos para la salud y aumentar los costos de análisis. A diferencia de estos métodos estándar, cada uno de los parámetros de calidad del aceite comestible

EQUIPO

Se midieron más de 1000 muestras de varios tipos de aceites comestibles (incluidos aceite de girasol, colza, sésamo y soja) en el analizador líquido OMNIS NIR en modo de transmisión (1000–2250 nm) utilizando viales desechables de 8 mm. El control de temperatura del analizador NIRS se ajustó a 40 °C para garantizar un rendimiento de medición constante. Se utilizó el software OMNIS para toda la adquisición de datos y el desarrollo del modelo de predicción.

mencionados se pueden analizar simultáneamente, sin preparación de muestras, y en pocos segundos mediante espectroscopia de infrarrojo cercano (NIRS) con el analizador OMNIS NIRS.



Figure 1. Analizador OMNIS NIR y muestra envasada en un vial desechable.

Tabla 1. Descripción general del equipo de hardware y software.

Equipo	Número de artículo
Analizador de líquidos NIR OMNIS	2.1070.0010
Soporte OMNIS NIR, vial, 8 mm	6.07401.070
Vial desechable, 8 mm, transmisión	6.7402.240
Licencia autónoma de OMNIS	6.06003.010
Licencia de software de desarrollo cuantitativo	6.06008.002

RESULTADO

Los espectros NIR obtenidos (**Figura 2**) se utilizaron para crear modelos de predicción para cuantificar los ocho parámetros de calidad del aceite: valor de yodo (IV), FFA, índice de refracción, ácido palmítico (C16:0), ácido esteárico (C18:0), ácido oleico (C18:1), ácido linoleico (C18:2) y ácido alfa-linolénico (C18:3). La calidad de los modelos de predicción se evaluó utilizando diagramas de correlación que muestran

una alta correlación ($R^2 > 0,94$) entre la predicción NIR y los métodos de referencia estándar para todos los parámetros. Del total, el 25% de las muestras fueron seleccionadas como conjunto de validación y el 75% restante como conjunto de calibración. Las respectivas cifras de mérito (FOM) muestran la precisión esperada y confirman la viabilidad durante el análisis de rutina (**Figuras 3–10**).

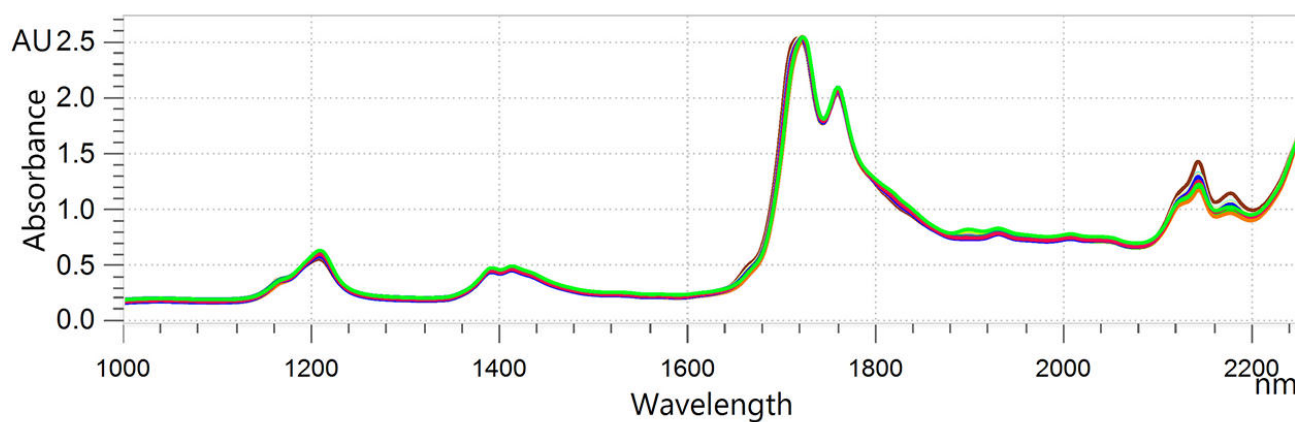


Figure 2. Espectros NIR superpuestos de muestras de aceite comestible que se analizaron en un analizador líquido NIR OMNIS a 40 °C con viales de 8 mm.

RESULTADO VALOR DE YODO

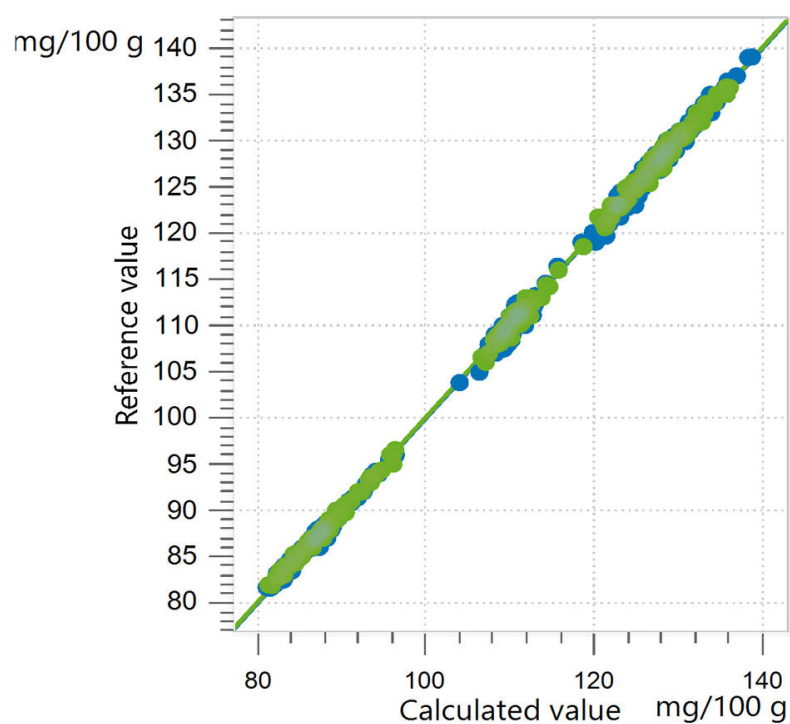


Figure 3. Diagrama de correlación y las respectivas cifras de mérito para la predicción del valor de yodo (también conocido como número de yodo) en aceites comestibles utilizando un analizador líquido OMNIS NIR. Los valores de referencia se evaluaron mediante cromatografía de gases.

Parámetro	SEC (mg/100 g)	VEC (mg/100 g)	PSE (mg/100 g)	R2CV
IV	0,47	0,48	0,50	0,999

RESULTADO ÁCIDOS GRASOS LIBRES

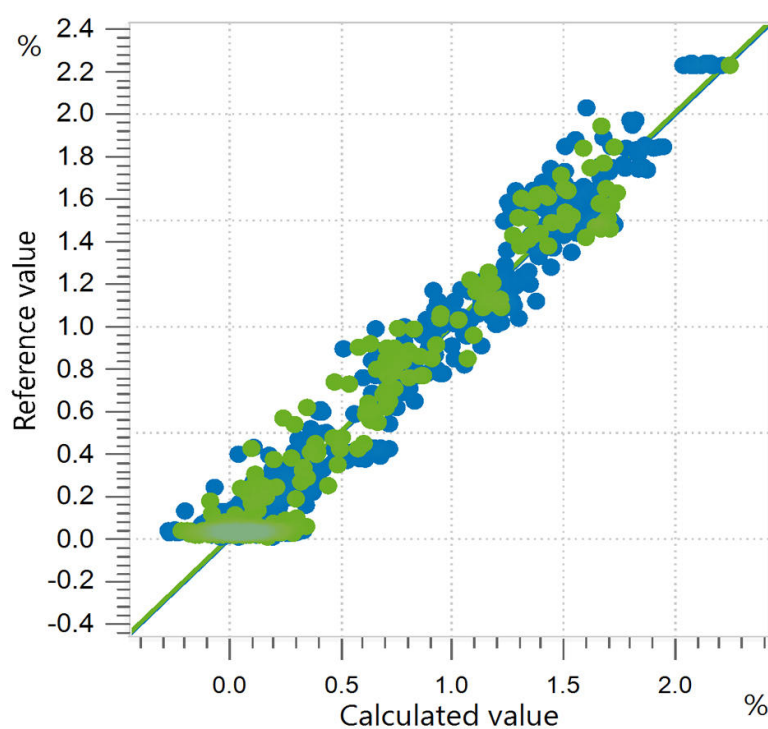


Figure 4. Diagrama de correlación y las respectivas cifras de mérito para la predicción de FFA en aceites comestibles utilizando un analizador líquido OMNIS NIR. Los valores de referencia se evaluaron utilizando un método de titulación.

Parámetro	SEC (%)	Valor de mercado secundario (%)	SEP (%)	R2CV
FFA	0,12	0,12	0,13	0,946

RESULTADO ÍNDICE DE REFRACCIÓN

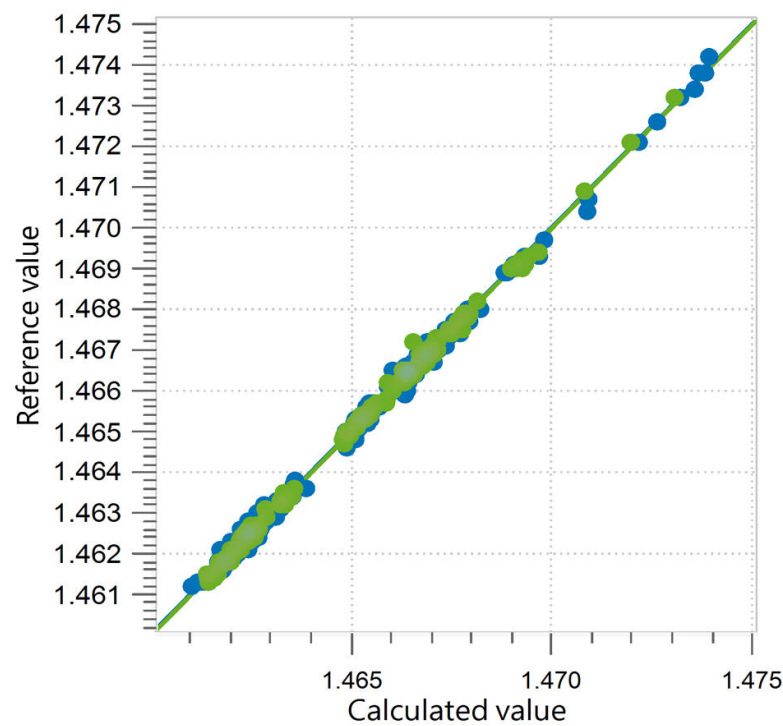


Figure 5. Diagrama de correlación y las respectivas figuras de mérito para la predicción del índice de refracción (IR) en aceites comestibles utilizando un analizador líquido OMNIS NIR. Los valores de referencia se evaluaron utilizando un refractómetro.

Parámetro	SEC (%)	Valor de mercado secundario (%)	SEP (%)	R2CV
RI	0,00011	0,00012	0,00012	0,998

RESULTADO CONTENIDO EN ÁCIDOS GRASOS C16:0

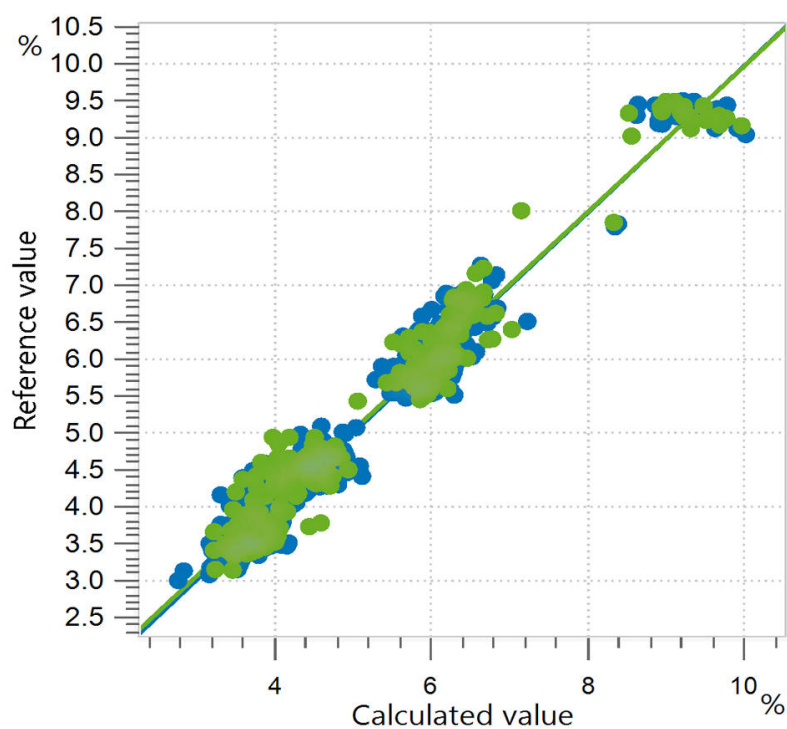


Figure 6. Diagrama de correlación y respectivas cifras de mérito para la predicción del contenido relativo de ácido graso C16:0 (ácido palmítico) en aceites comestibles utilizando un analizador líquido OMNIS NIR. Los valores de referencia se evaluaron mediante cromatografía de gases.

Parámetro	SEC (%)	Valor de mercado secundario (%)	SEP (%)	R2CV
C16:0	0,26	0,27	0,31	0,958

RESULTADO CONTENIDO EN ÁCIDOS GRASOS C18:0

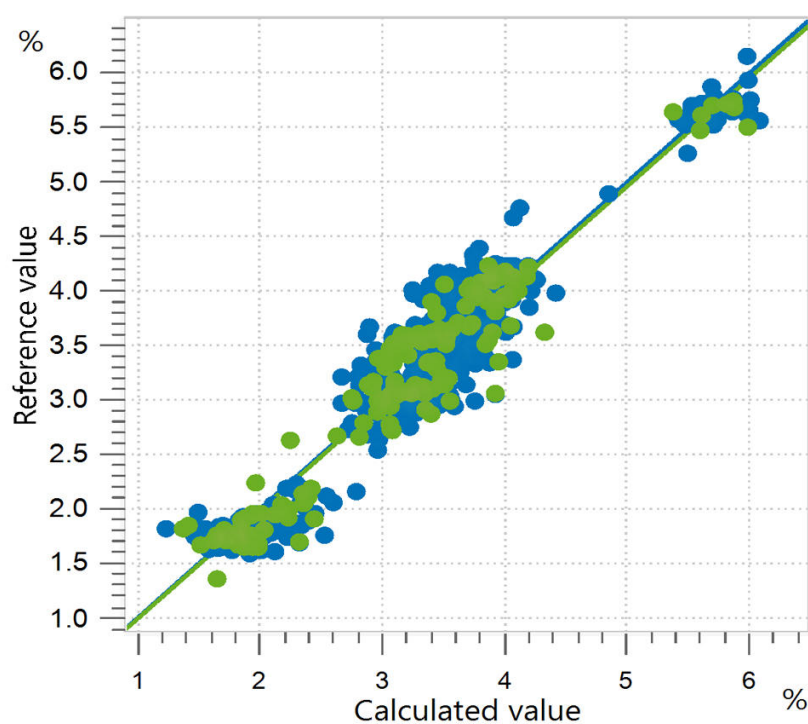


Figure 7. Diagrama de correlación y respectivas cifras de mérito para la predicción del contenido de ácido graso C18:0 (ácido esteárico) en aceites comestibles utilizando un analizador líquido OMNIS NIR. Los valores de referencia se evaluaron mediante cromatografía de gases.

Parámetro	SEC (%)	Valor de mercado secundario (%)	SEP (%)	R2CV
C18:0	0,26	0,27	0,25	0,936

RESULTADO CONTENIDO EN ÁCIDOS GRASOS C18:1

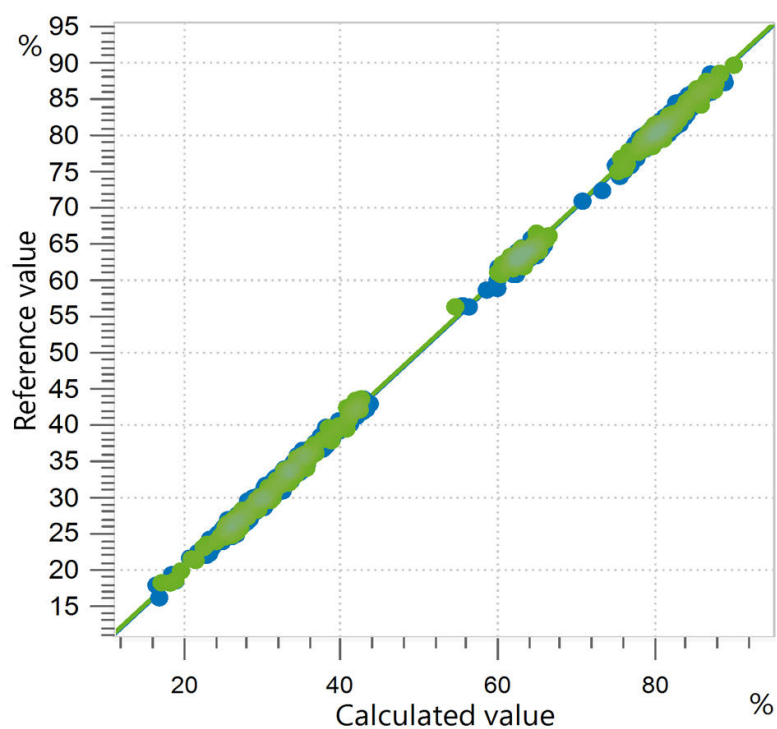


Figure 8. Diagrama de correlación y respectivas cifras de mérito para la predicción del contenido relativo de ácidos grasos C18:1 (ácido oleico) en aceites comestibles utilizando un analizador líquido OMNIS NIR. Los valores de referencia se evaluaron mediante cromatografía de gases.

Parámetro	SEC (%)	Valor de mercado secundario (%)	SEP (%)	R2CV
C18:1	0,64	0,67	0,71	0,999

RESULTADO CONTENIDO EN ÁCIDOS GRASOS C18:2

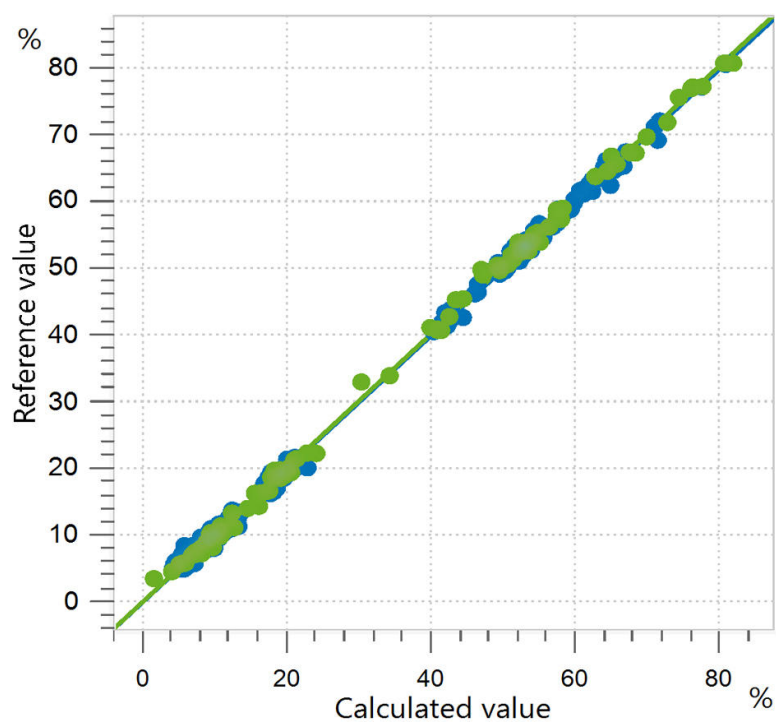


Figure 9. Diagrama de correlación y respectivas cifras de mérito para la predicción del contenido relativo de ácido graso C18:2 (ácido linoleico) en aceites comestibles utilizando un analizador líquido OMNIS NIR. Los valores de referencia se evaluaron mediante cromatografía de gases.

Parámetro	SEC (%)	Valor de mercado secundario (%)	SEP (%)	R2CV
C18:2	0,63	0,77	0,84	0,999

RESULTADO CONTENIDO EN ÁCIDOS GRASOS C18:3

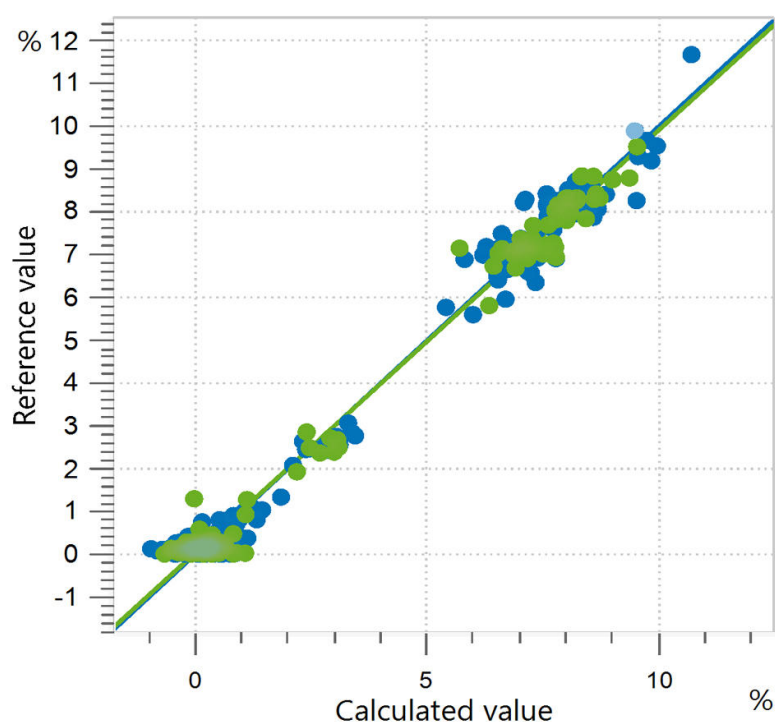


Figure 10. Diagrama de correlación y respectivas cifras de mérito para la predicción del contenido relativo de ácido graso C18:3 (ácido alfa-linolénico) en aceites comestibles utilizando un analizador líquido OMNIS NIR. Los valores de referencia se evaluaron mediante cromatografía de gases.

Parámetro	SEC (%)	Valor de mercado secundario (%)	SEP (%)	R2CV
C18:3	0,32	0,36	0,36	0,989

CONCLUSIÓN

Esta nota de aplicación muestra los beneficios de utilizar el analizador líquido OMNIS NIR para el análisis de rutina de varios parámetros de control de calidad en los laboratorios de fabricantes de aceite comestible. Todos los parámetros de calidad se pueden medir simultáneamente en sólo unos segundos. En comparación con otros métodos

convencionales, las mediciones realizadas con espectroscopia NIR no necesitan ninguna preparación de muestra ni disolventes. En última instancia, esto conduce a una reducción de la carga de trabajo (Tabla 2) y los costos relacionados, además de mantener más seguro al personal del laboratorio.

Tabla 2. Descripción general del tiempo para obtener resultados en la medición del valor de yodo, el contenido de FFA, el índice de refracción y la composición de ácidos grasos en aceites comestibles mediante métodos analíticos estándar.

Parámetro	Método	Tiempo en obtener resultados
Valor de yodo	Cromatografía de gases	30 preparación de muestra (esterificación de metilo + preparación de muestra) + 20 GC
Contenido de FFA	Valoración	10 minutos por muestra
Índice de refracción	Refractómetro	2 minutos por muestra
Composición de ácidos grasos	Cromatografía de gases	30 minutos por muestra

Referencia interna: AW NIR CH-0074-042023

CONTACT

Metrohm Hispania
Calle Aguacate 15
28044 Madrid

mh@metrohm.es

CONFIGURACIÓN



OMNIS NIR Analyzer Liquid

Espectrómetro del infrarrojo cercano para muestras líquidas.

El OMNIS NIR Analyzer es la solución de espectroscopía del infrarrojo cercano (NIRS) desarrollada y producida conforme a los estándares de calidad suizos para los análisis de rutina a lo largo de toda la cadena de producción. El empleo de las tecnologías más avanzadas y la integración en el moderno OMNIS Software se reflejan en la velocidad, la manejabilidad y el uso flexible de estos espectrómetros NIR.

Información general sobre las ventajas del OMNIS NIR Analyzer Liquid:

- Medidas de muestras líquidas en menos de 10 segundos
- Control de temperatura de la muestra: 25 °C...80 °C
- Detección automática de la colocación y la retirada del recipiente de muestras
- Fácil integración en un sistema de automatización o vinculación con otras tecnologías de análisis (titulación)
- Compatible con numerosos recipientes de muestras con distintas longitudes de recorrido



Soporte OMNIS NIR, vial, 8 mm

Soporte de viales para el OMNIS NIR Analyzer para viales desechables de 8 mm (6.7402.240).



Vial desechable, 8 mm, para transmisión, 100 unidades

100 viales desechables de vidrio (borosilicato) con una longitud de recorrido óptico de 8 mm para el análisis de líquidos en transmisión. Los viales desechables se suministran con los correspondientes tapones de cierre (100 unidades).

Compatibles con:

- Soporte OMNIS NIR para vial de 8 mm (6.07401.070)
- Soporte DS2500 para viales desechables de 8 mm (6.7492.020)

OMNIS
A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

Licencia "Stand-Alone" de OMNIS

Habilita el modo "Stand-Alone" del software OMNIS en un ordenador con Windows™.

Características:

- Se incluye una licencia de los aparatos OMNIS.
- Debe activarse en el portal de licencias de Metrohm.

OMNIS
A WHOLE NEW LEVEL OF PERFORMANCE

Licencia de software de Quant Development

Licencia de software para la creación y edición de modelos de cuantificación en una instalación de OMNIS Software "Stand-Alone".