UNIVERSIDAD DE JAÉN

FACULTAD DE CIENCIAS EXPERIMENTALES
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA FÍSICA Y ANALÍTICA

TESIS DOCTORAL

MODELADO DEL PROCESO DE ELABORACIÓN DE ACEITE DE OLIVA VIRGEN MEDIANTE REDES NEURONALES PREDICTIVAS

PRESENTADA POR:
ESTRELLA B. FUNES LÓPEZ

DIRIGIDA POR:
DR. D. ANTONIO JIMÉNEZ MÁRQUEZ
DR. D. GABRIEL BELTRÁN MAZA

JAÉN, 28 DE SEPTIEMBRE DE 2019

ISBN 978-84-9159-322-5

MODELADO DEL PROCESO DE ELABORACIÓN DE ACEITE DE OLIVA VIRGEN MEDIANTE REDES NEURONALES PREDICTIVAS

Aspirante al grado de Doctor

Estrella B. Funes López

Directores

Dr. Antonio Jiménez Márquez **Dr. Gabriel Beltrán Maza**

Jaén, Junio 2017

La presente Tesis Doctoral ha sido realizada dentro del marco del Proyecto de Excelencia P10-AGR6429 'Modelado y optimización del proceso de elaboración del aceite de oliva virgen. Proyecto I: Integración de sensores NIR y Redes Neuronales', financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación, y la Consejería de Econocmia, Innovación y Ciencia de la Junta de Andalucía.

Instituto de Investigación y Formación Agraria y Pesquera
CONSEJERÍA DE AGRICULTURA, PESCA Y MEDIO AMBIENTE

Unión Europea

Fondo Social Europeo

AGRADECIMIENTOS

No quería terminar esta etapa sin agradecer a todas las personas que han estado ahí de algún modo u otro.

A mis directores de tesis: Antonio Jiménez y Gabriel Beltrán, por sus orientaciones y su ayuda en la realización de este trabajo y por la oportunidad de comenzar mi carrera investigadora.

Al Director del Centro IFAPA 'Venta del Llano', Francisco Sanchez Arenas, por permitir la realización de esta tesis y su apoyo.

A todo el equipo del Laboratorio, Maite, Mª Carmen, Gloria y Manuela por su enseñanza y ayuda en las determinaciones analíticas, por la paciencia y disponibilidad que siempre han tenido.

A Juan y Justo, por su ayuda en la almazara, sin ellos no hubiera aprendido ni la mitad de las cosas y de tratarme como otra más a mí y a Yosra, compañera de proyecto y de fatigas en todo momento.

A mis compañer@s de despacho y penas conjuntas, Angelica, Araceli, Abraham, Elena, Paco, Aymen, y a los que fueron llegando poco a poco, Juan Diego, Pepe, Belén Manolo, y a los que se fueron antes de terminar esta aventura, Maika y Elena.

Y como no olvidarme de los que están siempre ahí Juan Carlos, Lola, Juan Cano, José Antonio, Teresa, Conchi y Toñi.

Y por supuesto a toda mi familia, a mis padres, hermanas por su apoyo moral en todo momento y ayuda con mi pequeña, Jimena, con lo mejor que podría haber empezado esta etapa y por la futura hermanita que la culminará con éxito. Y esto no hubiera sido posible sin Salva, mi compañero de viaje, de fatigas y de muchos momentos vividos y por vivir que nos esperan. Os quiero 'family'.

A todos, gracias.

Índice

Índice

Resumen……...…1

Capítulo 1. Introducción…..……..……7

1. El aceite de oliva……..…....9
2. Proceso de elaboración del aceite de oliva…….....….23
3. Control del proceso de extracción del aceite de oliva…….....….36
4. Espectroscopía en el infrarrojo cercano (NIR)……..…….....39
5. Redes Neuronales Artificiales……...……...……...…….60

Referencias……...……...……...……...70

Capítulo 2. Objetivos……...…….……85

Capítulo 3. Resultados…….……91

Capítulo 3.1. Resultados. Una revisión: Redes neuronales artificiales como herramienta de control de procesos en industrias alimentaria……...…..95

1. Introducción……..…….…….…..98
2. Similitudes entre redes neuronales biológicas (RNB) y redes neuronales artificiales (RNA)……..……...99
3. RNA: modelos, características, arquitectura, aprendizaje……..…….……101
4. RNA: desarrollo e implantación…….……..…….....105
5. Aplicaciones de redes neuronales …….....108
6. Aplicaciones en el sector del aceite de oliva..……..…….....113
7. Conclusiones…….…….....116

Referencias.…….…….…….....117

Capítulo 3.2. Resultados. Predicción de las características potenciales de la masa de aceituna……..……..…129

1. Introducción …….……...……....132
2. Materiales y métodos……...……....134
3. Resultados y discusión…….....……,.139
4. Conclusiones……..……...……...……..150

Referencias……..……..…….……151

Capítulo 3.3. Resultados. Un modelo RNA predictivo como simulador del proceso AOVE……..155

1. Introducción……...……...……...158
2. Materiales y métodos…….……...……159
3. Resultados……...…….……..……161
4. Conclusiones……...…….…..……170

Referencias……..……..…….……171

Capítulo 3.4. Resultados. Modelado de las primeras fases del proceso de extracción de aceite de oliva virgen usando la inteligencia artificial.....……..175
1. Introducción…….……...……...……..178
2. Material y métodos ……...……...180
3. Resultados y discusión…….……...……...……..185
4. Conclusiones ……...……...195
Referencias…….……197

Capítulo 3.5. Resultados. Modelos RNA´s predictivos para la optimización de la clarificación del aceite de oliva virgen extra mediante centrifuga vertical…..**.....**201
1. Introducción ……..…….…….……204
2. Materiales y métodos…….……...…….……..206
3. Resultados……...…….……....210
4. Conclusiones ……...……...218
Referencias..…….…….……..……....219

Capítulo 3.6. Resultados. Redes neuronales para la cuantificación en tiempo real en la almazara...…….…….....223
1. Introducción ……..…….……...…..……226
2. Material y métodos...……...……..…...227
3. Resultados y discusión.……..…...229
4. Conclusiones…….……..…..……..…..249
Referencias……..……..……..……250

Capítulo 4. Conclusiones…….253

Anexos….....257

Artículo 1. Publicado en Journal of Sensor and Technology…….……...259

Artículo 2. Publicado en Journal of Near Infrared Spectroscopy……..275

Artículo 3. En revision en Journal of Near Infrared Spectroscopy……..…....287

Artículo 4. Publicado en Journal of Food Process Engineering ……...315

Comunicaciones a congresos……..……....339

Diagrama de flujo del procedimiento general de busqueda de los modelos neuronales…….……...……...345

Resumen

Resumen

El objetivo principal de esta Tesis Doctoral ha sido estudiar la viabilidad de las redes neuronales artificiales junto con la tecnología NIR como instrumentos de apoyo a la optimización del funcionamiento del proceso de transformación de la aceituna en aceite de oliva virgen, así como, a partir de información en tiempo real de las diferentes variables que influyen en el proceso pueden integrarse en sistemas predictivos cuantitativos.

En este sentido, para llevar a cabo este propósito se comenzó desarrollando modelos neuronales capaces de caracterizar en tiempo real el fruto y el aceite extraído de la aceituna antes de su procesado y con ello poder establecer objetivos de control del proceso. Estos modelos diseñados a partir de información espectral de la masa de aceituna, junto con las diferentes variables qe intervienen en la fase de molienda, mostraron una buena capacidad predictiva para todos los parámetros analizados.

Atendiendo a los resultados obtenidos, se fueron diseñando diferentes modelos neuronales predictivos que simulasen el comportamiento del proceso de elaboración del aceite de oliva virgen a partir de la información espectral NIR e información de las variables del proceso, que permitiesen predecir las características de los productos de salida. De acuerdo con el producto con el objetivo marcado, el modelado neuronal fue diferente. Uno englobando todas las etapas del proceso y otros modelos para caracterizar las principales etapas: preparación de la pasta, centrifugación y clarificación. De forma que se pueda actuar desde cualquier etapa sin tener que modificar las demás.

Por último, para comprobar la viabilidad de las redes diseñadas y realizar un ajuste óptimo de las variables del proceso en un proceso de ‘feedback’, en función de los objetivos marcados, se obtuvieron modelos de calibración basados en redes neuronales. Dichos modelos permiten cuantificar los parámetros analizados de los productos finales del proceso, a partir de la información en tiempo real de los sensores NIR, y comparar así, los valores reales que salen de la planta real con las previstas.

Summary

The main objective of this thesis has been studying the feasibility of artificial neural networks together with the NIR technology as instruments of support for the optimization of the operation of the process of transformation of the olive oil extra virgin olive oil, as well as, on the basis of real-time information on the different variables that influence the process can be integrated into quantitative predictive systems.

In this sense, to carry out this purpose began developing neural models capable of characterizing in real time the fruit and the oil extracted from the olive before processing and thus be able to set targets for process control. These models are designed on the basis of spectral information of the mass of olive, along with the different variables that intervene in the milling stage, showed a good predictive capacity for all the analyzed parameters.

In response to the results obtained, were designed different neural models predictive that feign themselves the behavior of the process of elaboration of the virgin olive oil from the NIR spectral information and information on the process variables that would make it possible to predict the characteristics of the output products. In accordance with the product with the objective, the neuronal modeling was different. One encompassing all stages of the process and other models to characterize the main stages: preparation of the pasta, centrifugation and clarification. So that action can be taken from any stage without having to modify the other.

Finally, in order to verify the viability of the networks designed and the optimum adjustment of the process variables in a process of 'feedback', in function of the objectives were obtained calibration models based on neural networks. These models allow quantifying the analyzed parameters of the end products of this process, on the basis of the information in real time of the NIR sensors, and comparing as well, the actual values that come out of the Royal Service floor with previews.

Capítulo 1. Introducción

1. El aceite de oliva.

El aceite de oliva es definido por el Consejo Oleícola Internacional (2015) como el aceite procedente únicamente del fruto del olivo (Olea europaea L.), y extraído mediante procedimientos mecánicos, con exclusión de los aceites obtenidos por disolventes o por procedimientos de reesterificación y de toda mezcla con aceites de otra naturaleza.

Cuando un aceite proviene de frutos sanos y con un índice de madurez óptimo y son sometidos al proceso de extracción de forma adecuada, el aceite de oliva posee características organolépticas y físico-químicas excepcionales aportándole valor añadido al mismo. Este hecho, lo conocían nuestros antepasados, de ahí, que el cultivo del olivo sea considerado uno de los de mayor antigüedad. En nuestros días, el aceite de oliva es más que un cultivo, sobretodo en Andalucía, aunque cada vez son más los países que se unen a la producción de esta grasa saludable y así lo refleja la Figura 1 donde se muestra la evolución de la producción mundial de aceite de oliva.

La consideración de 'sector estratégico' del olivar y del aceite de oliva es incuestionable no sólo por su aportación a la riqueza y al empleo, sino también por las repercusiones ambientales, sociales, culturales y saludables.

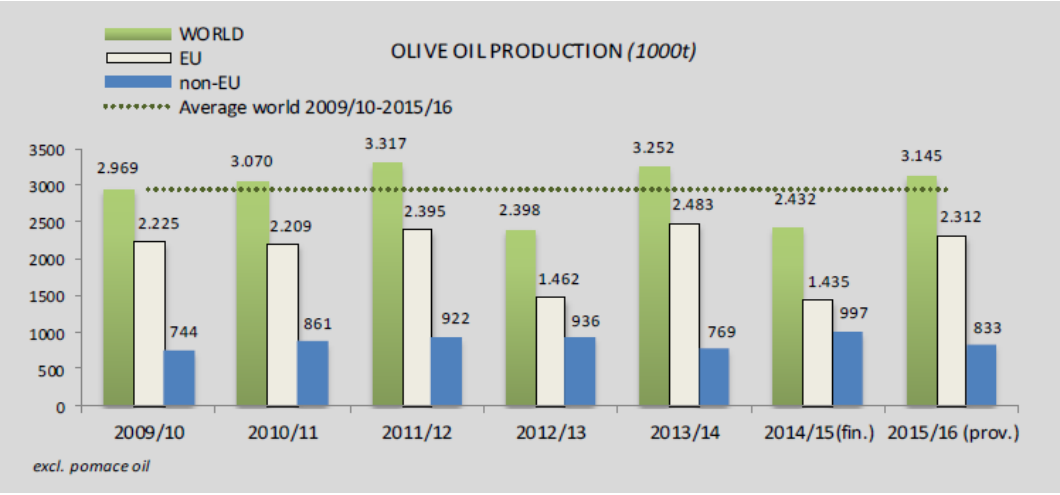


Figura 1. Evolución de la producción de aceite de oliva en el mundo. (Fuente COI)

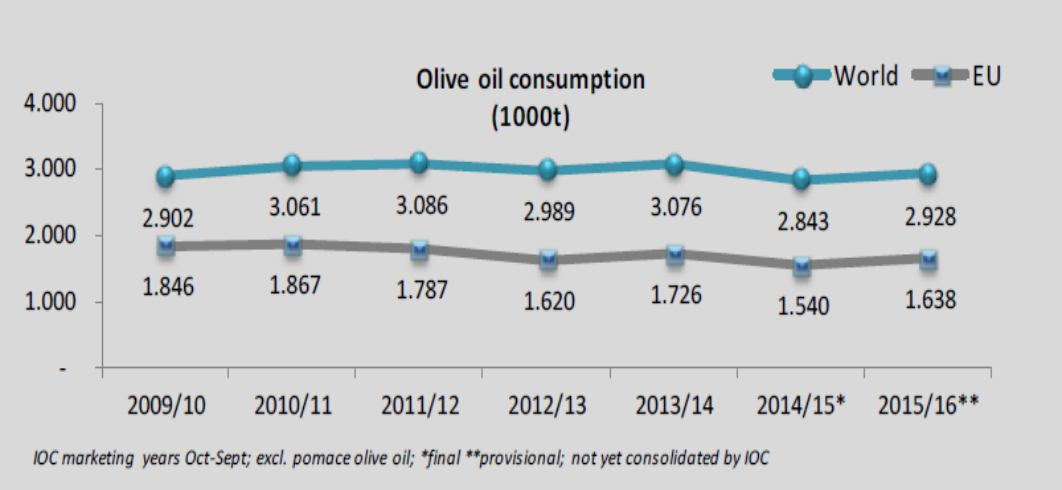


Figura 2. Evolución del consumo de aceite de oliva en el mundo. (Fuente COI)

Al igual que la producción, el consumo va ligeramente en aumento (Figura 2). Aunque en cada región del mundo se da preferencia al uso de los aceites que se producen, en el aceite de oliva se aprecia importantes incrementos de consumo en los países no productores y en los pequeños productores, pudiendo ser su capacidad de penetración en el mercado muy elevada. La principal razón parece estar en las propiedades beneficiosas para la salud que este aceite posee y que son ampliamente reconocidas. Estas propiedades revalorizan el aceite a través de la calidad y le proporciona un mecanismo diferenciador que le ayuda en su comercialización bajo unas nomenclaturas o declaraciones autorizadas, así como sus condiciones de uso.

No obstante, surgen dudas sobre a que se conoce como calidad del aceite de oliva. Según Burón y García Teresa (Burón and García-Teresa, 1979) la calidad del aceite de oliva es "el conjunto de propiedades o atributos que él posee y que determina el grado de aceptación del consumidor respecto a un determinado uso". En base a esto Uceda(Uceda et al., 2001) introduce dos cuestiones fundamentales, por un lado las características o atributos que aprecia el consumidor, que pueden ser intrínsecas o extrínsecas, pero, y esto es trascendental, ligadas a un determinado uso. Es decir, no se deben exigir las mismas propiedades a un aceite para usarlo en fritura que para aderezar ensaladas. Por ello propone para el aceite de oliva cinco tipos de calidad: calidad reglamentada, comercial (referida a la estabilidad del aceite y caducidad), sensorial (parte de la reglamentada), nutricional y terapéutica y culinaria (maridaje).

La unión de estos cinco tipos de calidades otorga al aceite de oliva virgen extra la máxima distinción que se le puede dar a un producto aportándole a su vez junto con una buena campaña de marketing el valor añadido que necesita un producto para aportar rentabilidad al productor. Es por ello que el concepto de 'calidad' sea de tan suma importancia y quede claro sus distintas connotaciones, de las cuales, la reglamentada y la nutricional se profundizan más a continuación.

Calidad nutricional y terapéutica

El aceite de oliva en su composición muestra una serie de propiedades nutricionales que aparecen en la lista de Declaraciones autorizadas de propiedades saludables de los alimentos, adoptada por la Comisión, (*Reglamento (UE) n^{o} 432*, 2012) previa consulta a la Autoridad europea de Seguridad Alimentaria.

Los nutrientes presentes en el aceite de oliva considerados que pueden utilizarse en la comercialización bajo unas declaraciones y condiciones de uso autorizadas son:

- Ácido oleico. Cuya declaración autorizada es la sustitución de grasas saturadas por grasas insaturadas en la dieta contribuye a mantener niveles normales de colesterol sanguíneo. El ácido oleico es una grasa saturada. Sólo se podrá utilizar respecto a alimentos con alto contenido de ácidos grasos insaturados (*Reglamento (CE) n^{o}1924*, 2006).

- Vitamina E. Cuya declaración autorizada es: la vitamina E contribuye a la protección de las células frente al daño oxidativo. Y solo puede utilizarse en alimentos que son, como mínimo, fuente de vitamina E (*Reglamento (CE) n^{o}1924*, 2006). La Vitamina E se encuentra en los tocoferoles.

- Los polifenoles. Cuya declaración es: los polifenoles del aceite de oliva contribuyen a la protección de los lípidos de la sangre frente al daño oxidativo. Y sólo puede usarse respecto a aceite de oliva que contenga un mínimo de 5 mg de hidroxitirosol y sus derivados por 20g de aceite de oliva,

indicando que el efecto beneficioso se obtiene con la ingesta de 20g de aceite de oliva.

Calidad reglamentada

El Reglamento del COI (COI, 2015), expresa claramente la definición de la aceptación de calidad en función de unos parámetros físicos-químicos y sensoriales, que originan una clasificación del aceite en diferentes categorías. De esta manera, cuando un aceite no cumple estos parámetros en una categoría pasará al nivel inmediatamente inferior. Los límites de cada parámetro establecidos para cada categoría vienen dados en el apartado 4 de dicho Reglamento.

De acuerdo con dicha normativa el aceite de oliva se puede clasificar en:

- Aceite de Oliva Virgen Extra: Es el zumo de la aceituna recolectada en su mejor momento de madurez y procesada adecuadamente con una acidez libre, expresada en ácido oleico, como máximo de 0,8 g por 100 g. Un contenido en ésteres etílicos inferior a 35 mg/kg. Tiene las características sensoriales que reproducen olores y sabores del fruto que procede, la aceituna. Con una mediana de los defectos igual a 0 y la mediana del atributo "frutado" superior a 0.

- Aceite de Oliva Virgen: Aceite de oliva virgen cuya acidez libre, expresada en ácido oleico, no supera los 2 g por 100 g, y que puede presentar ligeras alteraciones, bien sea en sus índices analíticos o en sus características sensoriales con la mediana de los defectos que es superior a 0 e inferior o igual a 3,5 y la del atributo "frutado" que es superior a 0. Estas alteraciones, sobre todo sensoriales, pueden ser prácticamente imperceptibles, pero deprecian la calidad del producto.

- Aceite de Oliva Lampante: Aceite de oliva virgen de gusto defectuoso o cuya acidez libre expresada en ácido oleico es superior a 2 g por cada 100 g. No es apto para el consumo en la forma que se obtiene al presentar graves alteraciones en sus índices físico-químicos o sensoriales con una a mediana de los defectos superior a 3,5, o bien la mediana de los defecto inferior o igual a 3,5 y la del

atributo “frutado” igual a 0, por lo que hay que someterlo a un proceso de refinamiento.

Habría que destacar que la reglamentación especifica del Consejo Oleícola Internacional (2015) incluye otras categorías de aceite de oliva corriente, de orujo de oliva entre otras, no relevantes para este estudio.

La calidad del aceite de oliva, tal como la define la Unión Europea, deriva de ser un zumo de fruta recogida en óptimas condiciones de madurez y sanidad, y por procedimientos mecánicos y/o físicos. Cuando la aceituna se deteriora o el proceso de extracción no es el adecuado, el aceite obtenido pierde sus cualidades potenciales, adquiriendo defectos que disminuyen su calidad, e incuso, pueden llegar a hacerlo no comestible directamente, de ahí que los métodos de análisis traten de poner de manifiesto los deterioros habidos en el aceite, proporcionando información sobre el grado de degradación del mismo. Estos criterios están definidos por parámetros que se miden a través de métodos físico-químicos y métodos sensoriales (Sánchez y Cobo, 2000).

Entre los parámetros considerados como de Calidad Reglamentada se pueden distinguir entre los parámetros de calidad y los parámetros de pureza siendo los valores de los parámetros primeros los que determinarán las diferentes calidades. Dentro de los parámetros de calidad se encuentran en la Tabla1.

- Características organolépticas: es el conjunto de sensaciones detectables como el olor, sabor y flavor. Este conjunto de sensaciones dependen de la variedad, técnicas de cultivo, de recolección y procesado del mismo. Sirve para distinguir aceites de las categorías virgen extra, virgen y lampante.

- Acidez libre, es un indicador de la cantidad de ácidos grasos libres presentes en el aceite, expresada en tanto por ciento de ácido oleico. La acidez es una anomalía que tiene su origen principalmente, en el mal estado de los frutos, mal tratamiento o mala conservación.

- Índice de peróxidos. Mide el estado de oxidación inicial de un aceite, se expresa en miliequivalentes de oxígeno activo por kilo de grasa y cuyo valor limitante para el consumo es de 20.

- Absorbancia o medida espectrofotométrica en el ultravioleta (UV): son indicadores de la presencia de un aceite de compuestos de oxidación complejos, distintos de los peróxidos. K_{232}, K_{270} y ΔK.

- Contenido en humedad y materia volátiles. Medidos en %.

- Contenido en impurezas insolubles en el éter de petróleo, medido en %. Éste parámetro y el anterior suponen en exceso, un peligro para la conservación del aceite.

- Esteres etílicos de los ácidos grasos (FAEEs), en AOVE no deben superar los 40 $mgkg^{-1}$ en la campaña 2013-2014; 35 $mgkg^{-1}$ en 2014-2015 y 30 $mgkg^{-1}$ en campañas posteriores a 2015 (Reglamento (UE) nº 1348/2013).

Tabla 1. Parámetros de calidad y pureza establecidos para las distintas categorías de aceite de oliva (COI, 2015).

	Extra virgin olive oil	Virgin olive oil	Ordinary virgin olive oil	Lampante virgin olive oil *	Refined olive oil	Olive oil	Crude olive-pomace oil	Refined olive-pomace oil	Olive-pomace oil
4.1 Organoleptic characteristics									
- odour and taste					acceptable	good		acceptable	good
- odour and taste (on a continuous scale):									
. median of defect . median of the fruity attribute	Me = 0 Me > 0	0 < Me ≤ 3.5 Me > 0	3.5 <Me ≤ 6.0**	Me > 6.0					
- colour					light yellow	light, yellow to green		light, yellow to brownish yellow	light, yellow to green
- aspect at 20°C for 24 hours					limpid	limpid		limpid	limpid
4.2. Free acidity % m/m expressed in oleic acid	≤ 0.8	≤ 2.0	≤ 3.3	> 3.3	≤ 0.3	≤ 1.0	no limit	≤ 0.3	≤ 1.0
4.3. Peroxide value in milleq. Peroxide oxygen per kg/oil	≤ 20	≤ 20	≤ 20	no limit	≤ 5	≤ 15	no limit	≤ 5	≤ 15

* It is not obligatory for the criteria in 4.1, 4.2 and 4.3 to be concurrent; one is sufficient.

** Or when the median of the defect is less than or equal to 3.5 and the median of the fruity attribute is equal to 0.

	Extra virgin olive oil	Virgin olive oil	Ordinary virgin olive oil	Lampante virgin olive oil	Refined olive oil	Olive oil	Crude olive-pomace oil	Refined olive-pomace oil	Olive-pomace oil
4.4. Absorbency in ultra-violet ($K^{1\%}_{1cm}$)									
- 270 nm (cyclohexane) / 268 nm (iso-octane)	≤ 0.22	≤ 0.25	≤ 0.30		≤ 1.10	≤ 0.90		≤ 2.00	≤ 1.70
- Δ K	≤ 0.01	≤ 0.01	≤ 0.01		≤ 0.16	≤ 0.15		≤ 0.20	≤ 0.18
- 232 nm*	≤ 2.50**	≤ 2.60**							
4.5. Moisture and volatile matter (% m/m)	≤ 0.2	≤ 0.2	≤ 0.2	≤ 0.3	≤ 0.1	≤ 0.1	≤ 1.5	≤ 0.1	≤ 0.1
4.6. Insoluble impurities in light petroleum % m/m	≤ 0.1	≤ 0.1	≤ 0.1	≤ 0.2	≤ 0.05	≤ 0.05		≤ 0.05	≤ 0.05
4.7. Flash point	-	-	-	-	-	-	≥ 120°C	-	-
4.8. Trace metals mg/kg									
Iron	≤ 3.0	≤ 3.0	≤ 3.0	≤ 3.0	≤ 3.0	≤ 3.0		≤ 3.0	≤ 3.0
Copper	≤ 0.1	≤ 0.1	≤ 0.1	≤ 0.1	≤ 0.1	≤ 0.1		≤ 0.1	≤ 0.1
4.9. Fatty acid methyl esters FAMEs)	∑ FAME + FAEE < 75 mg/kg (2012/13 crop year)								
Fatty acid ethyl esters (FAEEs)	FAEEs = 40 mg/kg (2013-2014 crop years) FAEEs = 35mg/kg (2014-2015 crop years) FAEEs = 30 mg/kg (after 2015 crop year)								
4.10. Phenols content	See section 11.24								

* This determination is solely for application by commercial partners on an optional basis.

** Commercial partners in the country of retail sale may require compliance with these limits when the oil is made available to the end consumer.

Además de la calidad hay otras determinaciones realizadas como criterio de pureza, más relacionados con la composición en sí del aceite de oliva para evitar posibles fraudes por mezclas con otro tipo de grasa.

1.1 *Composición del aceite de oliva*

La composición del aceite de oliva varía en función de diversos factores como son: variedad de aceituna, grado de maduración, condiciones agronómicas, condiciones climáticas y características tecnológicas de producción. Desde el punto de vista bromatológico, podemos establecer que la composición del aceite de oliva queda dividida en dos fracciones: fracción mayoritaria, que representa el 98- 99% del peso total del aceite, y fracción minoritaria, que alcanza sobre el 2% del peso del aceite de oliva, donde se recogen una gran cantidad de componentes menores que son muy importantes para la estabilidad, sabor, aroma y calidad del aceite de oliva (Boskou Dr., 2011; Koidis and Boskou, 2015; Boskou, 2015a).

Componentes mayoritarios

Dentro de la fracción mayoritaria, los triglicéridos constituyen el grupo mayoritario en el aceite de oliva. Los triglicéridos o triacilgliceridos son esteres de la glicerina y los ácidos grasos. La composición de ácidos grasos que conforma el perfil lípido de un aceite viene determinado por la zona de producción del aceite de oliva derivadas de la latitud, el clima así como la variedad y grado de maduración de las aceitunas que posteriormente son molturadas, siendo el más claramente marcado el tipo de cultivar o variedad (Moreda et al., 1995; Beltrán, G. et al., 2004; Blekas and Tsimidou, 2006).

En la Tabla 2 se observan los porcentajes de ácidos grasos que presenta un perfil de aceite de oliva según el Reglamento (COI, 2015).

Tabla 2. Diferentes ácidos grasos que contiene el aceite de oliva

Tipo de ácido graso	Cantidad
Ácidos grasos saturados	
Ácido palmítico (C16:0)	7,5-20%
Ácido esteárico (C18:0)	0,5-5%
Ácido mirístico (C14:0)	0- 0,05%
Ácido araquídico (C20:0)	0- 0,6%
Ácido behénico (C22:0)	0-0,2%
Ácido lignocérico (C24:0)	0- 0,2%
Ácido heptadecanoico (C17:0)	0-0,3%
Ácidos grasos monoinsaturados	
Ácido oleico (C18:1)	56-83%
Ácido palmitoleico (C16:1)	0,3-3,5%
Ácido heptadecenoico (C17:1)	0-0,3%
Ácido gadoleico (eicosanoico) (C20:1)	0- 0,4%
Ácidos grasos poliinsaturados	
Ácido linoleico (C18:2)	3.5-21%
Ácido α-linolénico (C18:3)	0- 0,9%

Componentes minoritarios

Los componentes menores encierran gran cantidad de componentes muy importantes para el la calidad del aceite, su caracterización y comportamiento. Las diversas clases de constituyentes menores pueden dividirse en dos grupos (Boskou, 2015a).

El primer grupo consta de fosfolípidos, ceras, ésteres de esteroles y esteres metílicos y etílicos. El segundo grupo incluye clases de compuestos que no están químicamente relacionados con los ácidos grasos. Son hidrocarburos, alcoholes alifáticos, esteroles libres, tocoferoles, clorofilas, carotenoides y compuestos fenólicos.

- Fosfolípidos

Su concentración total varía entre 40-135 ppm. El fosfolípido contiene dos ácidos grasos y un grupo fosfato unidos al glicerol siendo el ácido oleico es el ácido graso predominante. Los principales fosfolípidos encontrados en el aceite de oliva son: fosfatidilcolina, fosfatidiletanolamina, fosfatidilinositol y fosfatidilserina. El ácido graso predominante en la estructura de los fosfolípidos es el ácido oleico, y el patrón de ácidos grasos es similar al de los triglicéridos (Barranco et al., 2008; León-Camacho et al., 2013).

- Ceras

Las ceras son ésteres de alcoholes grasos con ácidos grasos. Las principales ceras de los aceites de oliva son ésteres C-36 a C-46. Se determinan como criterio de pureza con la cantidad máxima en el aceite de oliva virgen extra de 250 mg/ kg.

Las ceras se producen mediante una esterificación entre alcoholes presentes en el aceite y los ácidos grasos libres. Cuando se produce una hidrólisis de los triglicéridos se aumenta el contenido de ácidos grasos libres, originándose un aumento en la velocidad de reacción de esterificación.

Varios autores han demostrado que se producen un incremento en el contenido de ceras durante el almacenamiento del aceite de oliva virgen. Este incremento depende de la concentración de especies reactivas y de las condiciones de almacenamiento (León-Camacho et al., 2013).Además los aceites obtenidos en segunda centrifugación tienen valores más altos.

- Esteroles

Representan el 20-30% del total de la fracción insaponificable (Fedeli and Jacini, 1971). El contenido total en el aceite de oliva es del orden de 189-265 mg/100g, el cual se va reduciendo por oxidación durante la elaboración y almacenamiento (Boskou, 2015b).

Son compuestos con función alcohólica que se encuentran en todas las grasas en diversas cantidades y sus componentes en diferente proporción. El componente mayoritario es el β-sitosterol, y en cantidades muy escasas se encuentran el estigmasterol, campesterol, clerosterol y Δ5-Avenasterol (Morales and Przybylski, 2013).

- Hidrocarburos

En el aceite de oliva se encuentran dos hidrocarburos, escualeno y β caroteno. El escualeno es el hidrocarburo terpénico más importante en el aceite de oliva, precursor bioquímico de los esteroles, representa un 32 -50% del peso total de la fracción insaponificable.

Otros hidrocarburos son los carotenoides, se han encontrado luteína y β-caroteno en cantidades variables, siendo del orden de 0,15-0,44 y 0,08-0,5 mg/100g (Zonta and Stancher, 1987).

El β-caroteno actúa como atenuador del oxígeno simple en el proceso de fotooxidación del aceite de oliva, produciendo un efecto opuesto a los que ejercen los sensibilizadores (clorofilas y feofitinas). El β-caroteno está dotado de acción vitamina A y antioxidante no enzimático a nivel celular (Boskou, 2015a).

- Alcoholes alifáticos y triterpenos.

Los alcoholes triterpenos están presentes en el aceite de oliva, libres o esterificados con los ácidos grasos. La fracción triterpénica está compuesta principalmente por 24-metilen-cicloartenol, cicloartenol, β-amirina y α-amirina y en total representa el 20-26% de la fracción insaponificable. Los principales son Eritrodiol y Uvaol (León-Camacho et al., 2013).

- Tocoferoles

Los tocoferoles comprenden del 2,8 % al 3,5 % del total de los componentes menores. Es la forma α-tocoferol la que representa más de un 90% de todas las formas

encontradas en el aceite de oliva, siendo el γ-tocoferol, el isómero más activo biológicamente. El contenido en tocoferol depende mucho de la variedad de aceituna además disminuye con la maduración. Sus concentraciones varían desde 5 a 300 mg/kg. En los aceites de oliva, el contenido suele estar entre los 100 y 300 mg/kg. No obstante, la fluctuación del contenido de tocoferol en el aceite de oliva, se debe a su destrucción gradual durante la elaboración y el almacenamiento (Baldioli et al., 1996). Otros tocoferoles que contiene el aceite de oliva en pequeñas cantidades son β-tocoferol, γ-tocoferol, y δ-tocoferol. Su composición y contenido varía en función de la variedad y de la época de recolección (Beltrán et al., 2010b).

- Fenoles

Los compuestos fenólicos son moléculas que contienen uno o más anillos aromáticos hidroxilados, dividiéndose en compuestos tales como: derivados de fenil etanol, ácidos fenólicos, flavonas y flavonoides, secoroides, lignanos catequinas, procianidinas y antocianinas.

La composición fenólica de los aceites de oliva es el resultado de la interacción de distintos factores, incluyendo el cultivar, el grado de maduración, el clima, así como el tipo de molienda, condiciones de batido, etc (Jiménez A., Hermoso, M., Uceda, 1995; Uceda et al., 2008; Clodoveo et al.2014). La concentración de fenoles totales varía entre 50 y 1500 mg/kg de aceite (Morales and Przybylski, 2013). Los compuestos fenólicos proporcionan al aceite una gran resistencia ante la oxidación. Parece demostrado que el hidroxitirosol y el ácido caféico son los responsables de esta acción antioxidante y que otros ácidos como el tirosol y el ácido hidroxibenceno, ácido o-cumárico y ácido p-cumárico, tienen poca o ninguna contribución de los aceites vírgenes (Boskou, 2015b; Koidis and Boskou, 2015). Se ha demostrado la actividad biológica antioxidante de varios compuestos fenólicos como el ácido caféico y el hidroxitirosol (Brenes et al., 1999). La concentración de fenoles totales varía entre 50 y 500 mg/kg de aceite, pero se pueden encontrar aceites con contenidos de hasta 1500 mg/kg (Beltrán et al., 2000; Tsimidou and Blekas, 2006). La actividad antioxidante de los componentes del aceite de oliva virgen se ha relacionado con la protección frente a importantes enfermedades crónicas y degenerativas tales como las enfermedades coronarias (CHD), las

enfermedades de envejecimiento neuro-degenerativo y tumores localizados en diversas zonas (Boskou, 2015a, 2015b), entre otros efectos beneficiosos para el ser humano.

Por otra parte, los polifenoles también contribuyen a las propiedades organolépticas de los aceites de oliva vírgenes y han sido descritos como "amargos" y "astringentes" (Gutiérrez-Rosales et al., 1992; Baldioli et al., 1996; M. Tsimidou., 1998) así como responsables de características organolépticas en general, menos conocida es su faceta "picante" asociada a sensaciones que "queman" al gusto (M. Tsimidou., 1998; Servili and Montedoro., 2002; Higgins et al., 2010).

- Pigmentos

El aceite de oliva virgen tiene un color que va desde el verde hasta el amarillo, dependiendo de la variedad y del estado de madurez del fruto. Los pigmentos están también involucrados en mecanismos de autooxidación y fotoxidación. El aceite de oliva contiene dos tipos de pigmentos naturales:

Clorofilas y feofitinas: El aceite de oliva contiene clorofila "a" y clorofila "b", (pigmentos verdes), así como feofitina "a" y feofitina "b" (pigmentos marrones). Estos pigmentos son los responsables de color verde del aceite de oliva. El aceite de oliva de principios de campaña contiene clorofila "a" y "b" a una concentración de 1 a 10 ppm y feofitinas "a" y "b", de 0,2 a 24 ppm (Fedeli, 1977). El contenido clorofílico del aceite de oliva disminuye según progresa el proceso de maduración de los frutos (Boskou, 2015a). Las clorofilas y las feofitinas tienen un efecto prooxidante sobre los lípidos en presencia de luz, mientras que en la oscuridad actúan como antioxidantes, como consecuencia el aceite de oliva debe ser protegido durante su almacenamiento. A mayor nivel de clorofila en el aceite de oliva, mayor es su actividad fotocatalizadora (Gandul-Rojas et al., 2013; Morales and Przybylski, 2013).

Carotenoides: Los principales carotenos presentes en el aceite de oliva son: luteína, β-caroteno, violaxantina y neoxantina, cuyo contenido total varía entre 1 y 20 ppm en el aceite de oliva. El β-caroteno se encuentra en concentraciones que varían entre 0.5 y 4 ppm. Son los responsables del color rojo- amarillento.

- Compuestos aromáticos

La formación de compuestos volátiles es consecuencia de la destrucción celular de la aceituna, desencadenándose un proceso enzimático, donde se producen reacciones de hidrólisis y de oxidación. Entre los compuestos identificados en el aroma del aceite de oliva virgen, existen una cantidad apreciable de ellos (Morales and Przybylski, 2013) que aportan aromas tanto positivos como negativos y que repercuten en la calidad sensorial del aceite. La fracción volátil del aceite de oliva virgen se puede agrupar en: hidrocarburos alifáticos y aromáticos, alcoholes alifáticos, terpenos oxigenados, aldehídos, cetonas, derivados tiofénicos, ésteres de seis átomos de carbono (C6), y diversos compuestos de cinco átomos de carbono (C5) que son los principales responsables de las notas sensoriales verdes y frutadas propias del aceite de oliva virgen de alta calidad. (Angerosa, 2003; León-Camacho et al., 2013; Sánchez-Ortiz et al., 2013).

2 Proceso de elaboración del aceite de oliva.

El aceite de oliva virgen es el zumo oleoso procedente únicamente del fruto del olivo (Olea europaea L.), de las aceitunas por procedimientos únicamente mecánicos con exclusión de los aceites obtenidos por disolventes o por procedimientos de reesterificación y de toda mezcla con aceites de otra naturaleza (COI, 2015). Se trata de un proceso físico de extracción basado en un sistema continuo dividido en etapas: acondicionamiento de la pasta (molienda y batido), extracción y clarificación del aceite. Este sistema es el resultado del proceso evolutivo que ha sufrido el proceso de obtención del aceite desde los molinos de empiedro seguidos de la fase de extracción por presión para posteriormente decantar el aceite extraído en pozuelos de decantación (Alba, 2008). Estos sistemas continuos ya sean de dos o tres fases en la extracción de fases sólida y líquida (Alba, 2008) están regulados y controlados mediante diferentes variables del proceso: mecánicas, tecnológicas y analíticas que ayudan a optimizar el proceso de obtención del aceite en base a unos determinados objetivos:

- obtención de la máxima calidad de aceite,
- mínima pérdida de aceite en el orujo, consiguiendo la máxima extractabilidad
- máximo respecto al medio ambiente, optimizando la energía consumida y minimizando los residuos.

En la Figura 3 se muestra un esquema de las fases con unas operaciones previas, preparación y acondicionamiento de la pasta, extracción del aceite y clarificación del mismo así como su almacenamiento y conservación.

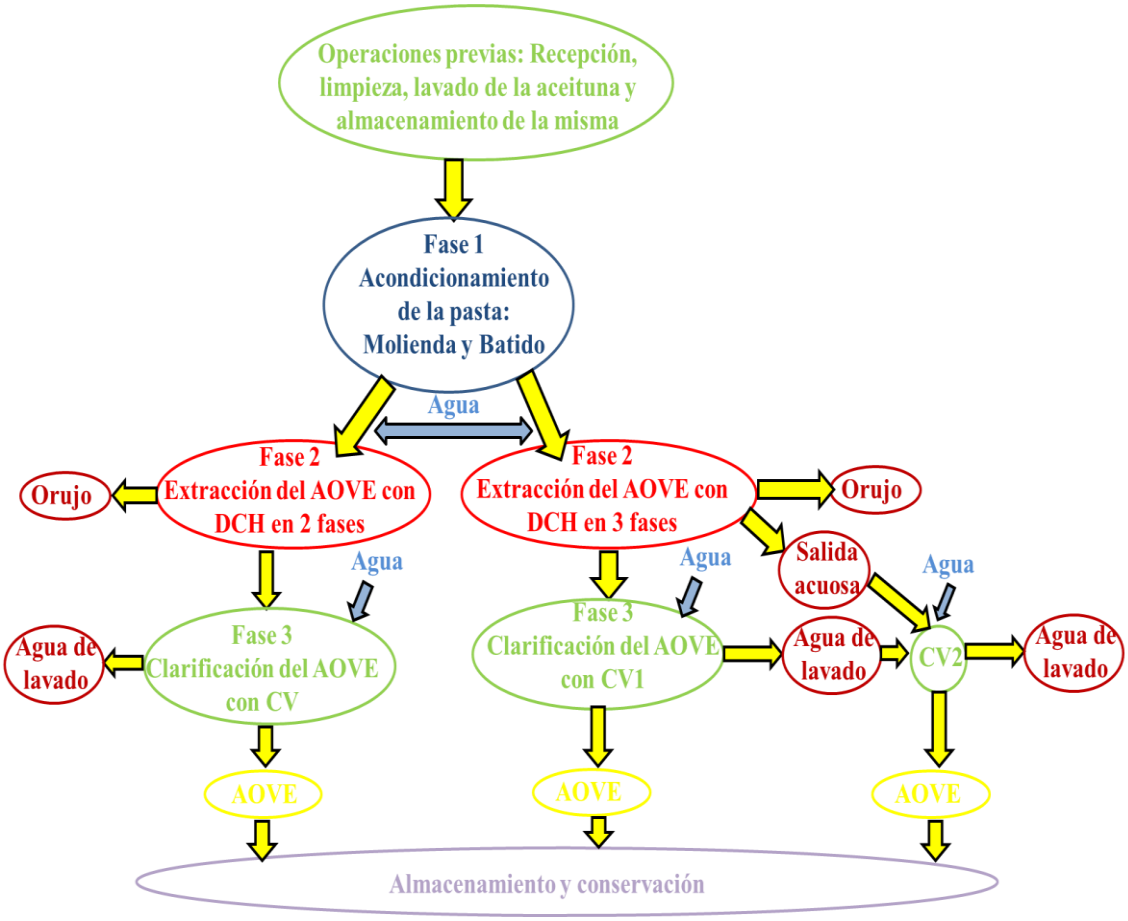


Figura 3. Diagrama de flujo en el sistema contínuo de elaboración de los aceites de oliva vírgenes.

2.1 *Operaciones previas: Recepción, limpieza y almacenamiento*

Las operaciones tecnológicas asociadas a la extracción del aceite llevan consigo la realización de algunas etapas preliminares: recepción, limpieza y lavado y almacenamiento (Uceda et al., 2008). Tras su recolección, las aceitunas deben ser clasificadas a la entrada de la almazara de acuerdo con la variedad, sistema de cultivo riego o secano, si proceden de vuelo o de suelo, calidad potencial (fruto dañado o sano) para poder someterlas a diferentes tratamientos. Todos estos factores influyen de gran manera en la elaboración del aceite y en la calidad del mismo (Hermoso et al., 1998b;Alba, 2008; Uceda et al., 2008). Tras ser clasificadas, las aceitunas son descargadas en la línea de limpieza donde se separarán las hojas, ramas, piedras y demás cuerpos extraños y posteriormente se lavarán. En esta etapa las aceitunas de vuelo que normalmente vienen limpias se debería de evitar el lavado, pues el agua residual interfiere en las operaciones de extracción disminuyendo la extractabilidad, pasando parte de la grasa al orujo y ocasionando pérdidas de estabilidad e intensidad en los atributos organolépticos de los aceites sobre todo en el frutado (Alba, 2008; Beltrán et al., 2016). Sin embargo, las aceitunas procedentes de suelo además de la limpieza, deben ser sometidas a un lavado con agua que ayudará a eliminar los elementos que acompañan a estas aceitunas (piedras, tierra elementos metálicos…), por diferencia de densidad (Beltrán et al., 2016).

Una vez limpias las aceitunas son pesadas y almacenadas en las tolvas de espera a ser procesadas. En éstas deben estar el mínimo tiempo posible, pues desde que la aceituna es separada del árbol comienza una descomposición de la materia orgánica, con desintegración de las paredes celulares y el epicarpio pierde la cualidad de barrera antimicrobiana. En las tolvas la aceituna están creando trojes sometidas a diferentes temperaturas y presiones que junto con la acción de mohos y levaduras pueden tener efectos lipolíticos y oxidar el aceite transfiriendo al mismo sabores organolépticos desagradables (Alba, 2008; Beltrán et al., 2016).

2.2 *Preparación de la pasta*

Para la separación del aceite de oliva virgen, en fase oleosa continua, sin alteraciones de su composición y de sus características organolépticas, de los demás componentes de la aceituna, es necesario realizar una primera fase de preparación y acondicionamiento de la pasta que a continuación se describe.

2.2.1 *Molienda*

Para llevar a cabo la extracción del aceite es necesario romper los tejidos vegetales de la aceituna, liberando el aceite contenido en las vacuolas del mesocarpio, dando lugar a la pasta de aceituna. Dicha pasta está formada por partes solidas (pulpa, hueso) y partes líquidas (agua y aceite). Las gotas de aceite celular se ponen en contacto con otros componentes no glicéridos produciéndose transferencias de pigmentos, ceras y alcoholes alifáticos, constituyentes del epicarpio, entre las diferentes fases de la pasta. La rotura del tejido del mesocarpio de la aceituna y la formación de la pasta se realiza a través de la molienda y del modo en que se realice darán lugar a partículas de diferente tamaño y afectando al rendimiento del proceso de extracción y consecuentemente a las características físico-químicas y organolépticas del aceite resultante (Hermoso et al., 1998; Alba, 2008).

Actualmente, la trituración se realiza mediante molinos metálicos entre los que se encuentran los de martillos con criba perforada fija o rotante, los molinos de Listello, de doble criba, de discos dentados y de cilindros estriados (Di Giovacchino, 2013), siendo los molinos de martillos con criba fija los más usados. En éstos, la molturación se produce por la acción de los martillos que giran a un elevado número de vueltas (1.500-3.000rpm) golpeando a la aceituna contra la criba perforada de diferente diámetro (Sd=4-7mm), y donde siguen siendo golpeados hasta que tienen el tamaño suficiente para poder salir por los taladros de ésta hacia el exterior.

Dentro de la molienda hay determinadas variables a tener en cuenta para regular los molinos como son la velocidad de giro de los martillos, el tamaño de criba así como el caudal de alimentación al molino. La regulación de estas variables de acuerdo con las

características de la aceituna a moler determina el rendimiento del proceso, además de las características del aceite (Hermoso et al., 1998b; Beltrán et al., 2010a).

No obstante hay que tener en cuenta que grados de molienda excesivamente gruesos para el tipo de aceituna que se trata no se consigue la correcta rotura de tejidos y por tanto parte del aceite se pierde al irse con el orujo. Así mismo si es excesivamente fino el grado de molienda puede provocar emulsiones que dificultan la extracción posterior (Di-Giovacchino et al., 2002; Clodoveo et al., 2014). La velocidad de giro no debe ser muy alta para evitar la posible oxidación de la pasta y la consecuente pérdida de aromas, por la aireación de la misma, aunque se produzcan aceites con mayores compuestos fenólicos en su forma (Di-Giovacchino et al., 2002). Así mismo la molienda se debe realizar de forma que se consiga la mayor uniformidad posible, dentro del grado de molienda y velocidad elegida, para conseguir la máxima efectividad en el batido.

Se ha comprobado como los diferentes tipos de molinos no llegan a modificar la composición acídica de los aceites producidos ni los tocoferoles y ni los parámetros de la calidad reglamentada (Di-Giovacchino et al., 2002). Sin embargo, el contenido de antioxidantes naturales, pigmentos y volátiles se muestran en diferentes contenidos de acuerdo con el molino a utilizar para una misma aceituna. De los empiedros, por su efecto de dilacerado de los frutos, se obtienen aceiten con menor contenido en polifenoles y por lo tanto menos amargos y picantes y más ricos en volátiles que los obtenidos con molinos de martillos (Di-Giovacchino et al., 2002; Alba, 2008; Inarejos-García et al., 2011; Di Giovacchino, 2013). En cambio, el uso de éste tipo de molino metálico aporta aceites más verdes, con mayores contenidos en pigmentos clorofílicos, y tocoferoles (Di-Giovacchino et al., 2002; Inarejos-García et al., 2011).

2.2.2 *Batido*

El batido de la pasta de aceituna es una etapa clave en el proceso de obtención del aceite de oliva virgen, siendo fundamental en la obtención de un aceite de calidad rico en antioxidantes y con las mejores propiedades organolépticas. Mediante el lento y continuo batido se consiguen reunir las pequeñas gotas de aceite en otras de tamaño superior, rompiendo para ello, las emulsiones de aceite en agua producidas durante la

molienda de las aceitunas (Alba, 2008). De esta manera se favorece la extracción del aceite por la coalescencia o agregación de las gotas de aceite, para maximizar el rendimiento de extracción, a la vez que se produce diversos de compuestos volátiles responsables del aroma de los aceites de oliva (Clodoveo, 2012). Al mismo tiempo se transforman los compuestos fenólicos desde la forma glicosilada (de gran polaridad y por ello con mayor afinidad por la fase acuosa), hacia compuestos menos polares que se van a repartir entre agua y aceite. Este hecho es explicado por Clodoveo en sus revisiones (Clodoveo, 2012; Clodoveo et al., 2014). Esta operación se lleva a cabo en termo-batidoras que consisten en tanques cilíndricos o semicilíndricos de acero inoxidable, equipados con una camisa en sus paredes para la circulación de agua caliente y un sistema de agitación (Figura 4). Éste sistema está formado por aspas rotatorias de diferentes tamaños y formas en función de la marca comercial y de acuerdo con la orientación del eje de rotación de éste sistema pueden ser horizontales o verticales, siendo las primeras las más utilizadas.

Figura 4. Termo-batidoras horizontales

Dentro del batido se producen transferencias de energía, en general, calorífica, y de componentes entre la fase oleosa homogénea y un conjunto de fases heterogéneas de naturaleza acuosa (agua de vegetación y pulpa). Ésta transferencia depende de las características geométricas de la batidora, giro de las palas, el estado de la aceitunas, así como del grado de madurez, del contenido en aceite y de la humedad de las aceitunas, así como la forma de realizar el batido, teniendo en cuenta que una metodología de

elaboración del aceite que haya resultado conveniente para un tipo de aceitunas puede no ser adecuada al tratar otro tipo (Gómez, 2007).

Así pues, es de vital importancia llevar un control exhaustivo de determinadas variables y poder regularlas ya que inciden notablemente en el rendimiento del proceso y las características finales del aceite. Estas variables son:

- *Velocidad de giro de las palas.* Por lo general, la velocidad debe oscilar entre 15 y 30 rpm. A mayor velocidad se puede producir emulsiones que dificultan la extracción. En pastas difíciles debe reducirse. Esta velocidad no tiene efecto en las características del aceite.

- *El tiempo de batido(tm).* Debe ser lo suficiente para asegurar el mayor porcentaje posible del aceite suelto, entre 45 a 60 minutos, pudiendo ser superior en el caso de pastas difíciles (Di-Giovacchino et al., 2002; Alba, 2008;Aguilera et al., 2010; Di Giovacchino, 2013;). Así mismo, el rendimiento, valorado como porcentaje de aceite extraído sobre el total del aceite presente el en fruto, aumenta con el incremento del tiempo disminuyendo así la cantidad de aceite residual en el orujo, pudiendo tener un efecto negativo sobre el mismo cuando se excede del tiempo (Di Giovacchino, 2013). Aunque se hayan encontrado indicios de una disminución de polifenoles de forma inversa al tiempo de batido (Aguilera et al., 2015), para los parámetros reglados no se han encontrado relación significativa con esta variable (Aguilera et al., 2010; Clodoveo, 2012), sino que las posibles variaciones de dichos parámetros y del perfil sensorial de los aceites obtenidos viene determinado por la variedad a procesar, el estado de maduración de esta, etc. (Di-Giovacchino et al., 2002).

- *La temperatura de la pasta (Tm).* Las altas temperaturas (40° C) ayudan a disminuir la viscosidad de forma que es mucho más fácil separar el aceite obteniendo así rendimientos más altos aunque una temperatura excesiva da lugar al desarrollo de procesos oxidativos con la consecuente formación de productos de oxidación, disminución del contenido en compuestos fenólicos y aumento de ácidos grasos libres (acidez) (Aguilera et al., 2010). Aunque se ha comprobado

como la temperatura tiene una relación directa con el contenido de polifenoles aportando mayor amargor y estabilidad a los aceites (Fregapane and Salvador, 2013; Aguilera et al., 2015). Ya con temperaturas superiores a 25ºC los volátiles del aceite disminuyen y con ello su fragancia. Por el contrario temperaturas bajas entre 18-20ºC no permiten obtener rendimientos de extracción satisfactorios, sin embargo, la calidad del aceite en cuanto al perfil sensorial se mantiene por lo que cada vez más, son los productores que utilizan estas temperaturas en sus primeros aceites de alta gama.

- *La adición de coadyuvantes.* Las características y el estado de maduración y humedad de la aceituna a procesar influye mucho en los parámetros de batido ya que pueden producir 'pastas difíciles' de procesar. En este caso se pueden adicionar coadyuvantes tecnológicos en proporciones pequeñas que ayudan al proceso de separación de forma física y sin afectar a la calidad de los aceites obtenidos. El coadyuvante más utilizado es el microtalco natural (MTN) (Uceda et al., 2008; Aguilera et al., 2010; Clodoveo, 2012).

De esta forma hay que llegar a un consenso entre a mantener la calidad del aceite obteniendo el máximo rendimiento del mismo y en este sentido tienen que ir unidas tanto el tiempo como la temperatura de batido (Clodoveo, 2012). Para llegar a ello se recomienda temperaturas de batido inferiores a 30ºC con tiempos de batido no superiores a 90 minutos.

No obstante, la investigación está avanzando en este tema incluyendo los ultrasonidos en el batido obteniendo resultados sorprendentes pudiendo llegar a ser sustitutivo de la batidora (Bejaoui et al., 2016; Bejaoui, M.A. et al., 2016). En otros estudios, se pretende dar solución al problema de la oxidación del aceite durante el batido por la aireación quitando el oxígeno expuesto a la pasta con batidoras inertizables (Clodoveo et al., 2014).

2.3 *Sistema continuo de extracción: Extracción sólido-líquido*

Una vez batida la pasta y reunidas en una gran fase líquida el aceite y el agua hay que separarla de la fase sólida (orujo) compuesta por trozos de hueso, pulpa y otros

restos de tejidos de aceituna. En los sistemas de extracción continuos la separación de las fases de la pasta se produce mediante la centrifugación, que puede ser de dos o tres fases (Figura 5). Actualmente en España el sistema más usado es el de dos fases, con alperujo como subproducto (constituido por la mezcla del orujo y alpechín) y que presenta una humedad próxima al 65%. Por lo tanto con este sistema se producen sólo dos fracciones: aceite (con pequeñas impurezas debidas al alpechín y algunos residuos sólidos) y el alperujo (por cada 100 kg de aceitunas se obtienen en torno a 75-80 kg de alperujo). El sistema de extracción por centrifugación que se ha impuesto es el de dos fases, por dos razones fundamentales:

- reducción muy significativa en el consumo de agua, fundamentalmente en la adición de agua a la pasta antes de su extracción, lo que da lugar a la obtención de aceites con mayor contenido en componentes fenólicos al no producirse el efecto de lavado sobre estos componentes, que por el contrario se produce en los sistemas de tres fases por su contínuo y alto requerimiento de agua de dilución de la pasta, evitando así la pérdida de los antioxidantes naturales y el consiguiente deterioro de la calidad de los aceites (Di-Giovacchino et al., 2002; Alba, 2008; Di Giovacchino, 2013).

- menor impacto medioambiental, puesto que se produce menor cantidad de alpechín (residuo líquido contaminante), al aportarle menor cantidad de agua, y este se mezcla junto con el orujo, siendo retirado junto a éste para la posible extracción del aceite que contiene por parte de las orujeras.

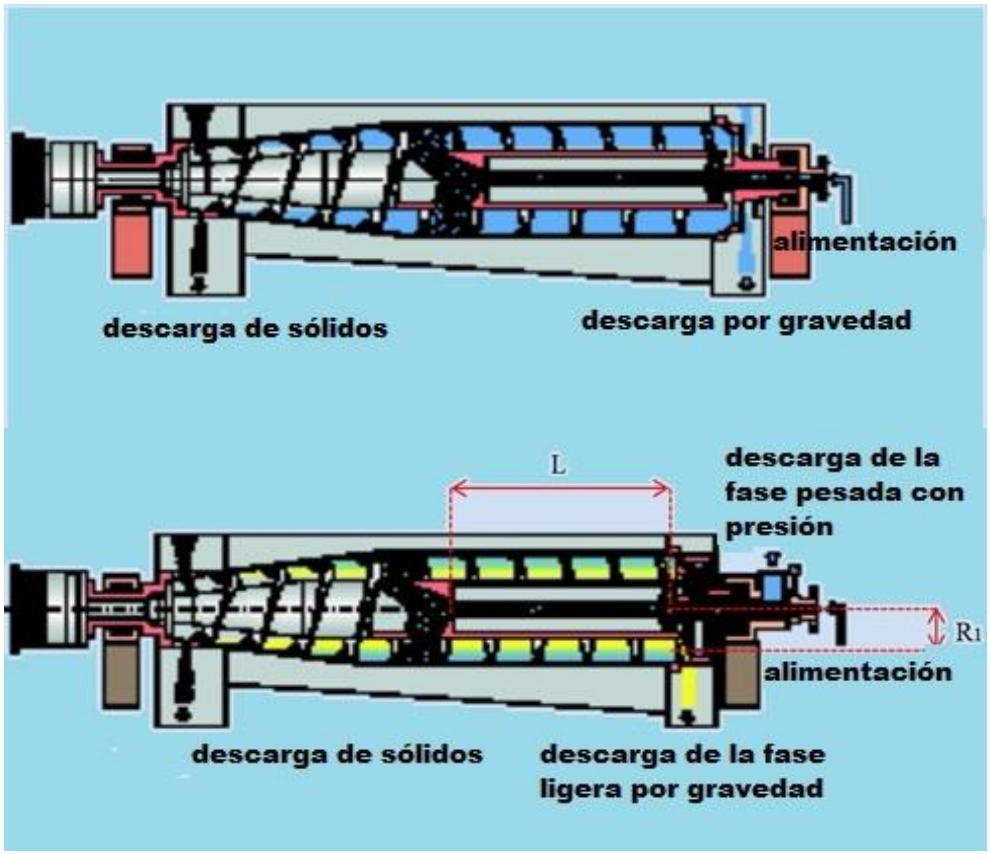


Figura 5. De arriba a abajo, esquema de funcionamiento de un decanter de dos fases y de tres fases.

El decantador centrífugo horizontal (DCH) posee un tambor cónico-cilíndrico donde es introducida la pasta mediante un tubo axial o caña. Dicho tambor gira a gran velocidad, sometiendo a la pasta a una centrifugación. Dentro del tambor hay un tornillo sinfín girando a una velocidad distinta a la del tambor produciendo un movimiento de arrastre que permite extraer a los sólidos por la parte cónica del bol y por el lado opuesto, la fase líquida a través de unas aberturas regulables (Alba, 2008).

El punto en que la caña (L) descarga la pasta de aceituna en el decanter puede ser regulado, obligando a acortar o alargar los recorridos respectivos de las fases líquidas o sólidas. Del mismo modo se utilizan diafragmas que definen el punto de salida del aceite. El grado de clarificación del aceite se puede regular modificando la posición de éste punto, medido por la distancia a la que se sitúa respecto del eje de rotación (R_1).

Dentro del sistema de extracción elegido son dos las variables a tener en cuenta, la inyección de la pasta (Fp) y la adicción de agua a la entrada del decanter (Fw), pues ambos influyen en el funcionamiento del decanter y en la correcta extracción del aceite

para conseguir buenos rendimientos. El caudal de la pasta más adecuado está condicionado por las características de la aceituna a procesar así como de las condiciones de preparación de la pasta (Hermoso et al., 1998a). Manteniendo constantes las características geométricas del DCH, las variaciones de Fp afectan al tiempo de residencia de la masa en el interior del decanter, de forma que un incremento de Fp conduce a un paso más rápido por el separador centrífugo. Este hecho provoca un incremento del contenido de polifenoles en los aceites obtenidos, siendo éstos más amargos, y más estables frente a la oxidación (Jiménez et al., 1995). Aunque el sistema de dos fases no necesita agua para fluidificar la pasta como el caso del de 3 fases, si puede necesitar una cantidad de agua, la que le falte a las aceitunas para conseguir la humedad óptima. Hermoso et al. 98 establecieron como orientación una determinada dosis de agua en función de la humedad de la pasta (Hermoso et al., 1998a). No obstante, la cantidad de agua a añadir afecta al contenido en compuestos fenólicos ya que son más solubles en agua que en aceite, y por tanto, a la estabilidad del AOV durante su almacenamiento (Di-Giovacchino et al., 2002; Di Giovacchino, 2013). Por lo general, los aceites extraídos por el sistema de dos fases al necesitar menos agua, la cantidad de antioxidantes naturales es mayor, aportando a los aceites mayores intensidades en amargo áspero y astringente (Uceda et al., 2008).

2.4 *Extracción líquido-líquido. Clarificación*

Una vez que se han separado las fases sólidas de las líquidas, esta última tiene que someterse a una clarificación. Esta fase líquida conocida también como ‘mosto oleoso’ va acompañada de una cantidad muy variable de impurezas dependiendo no sólo de las características del fruto procesado sino, también, de las condiciones de procesado en las etapas previas (molienda, batido y separación en decanter). Existen varias técnicas de clarificación, dentro de las cuales, el sistema más extendido y empleado en este trabajo es la centrifuga vertical (CV). Estos equipos trabajan sobre el principio de aplicación de la fuerza centrífuga (Figura 6), a un régimen elevado de revoluciones (entre 5000 –

8000 rpm, según el tamaño) en los que el aceite se clarifica de manera inmediata (Jiménez et al., 2014).

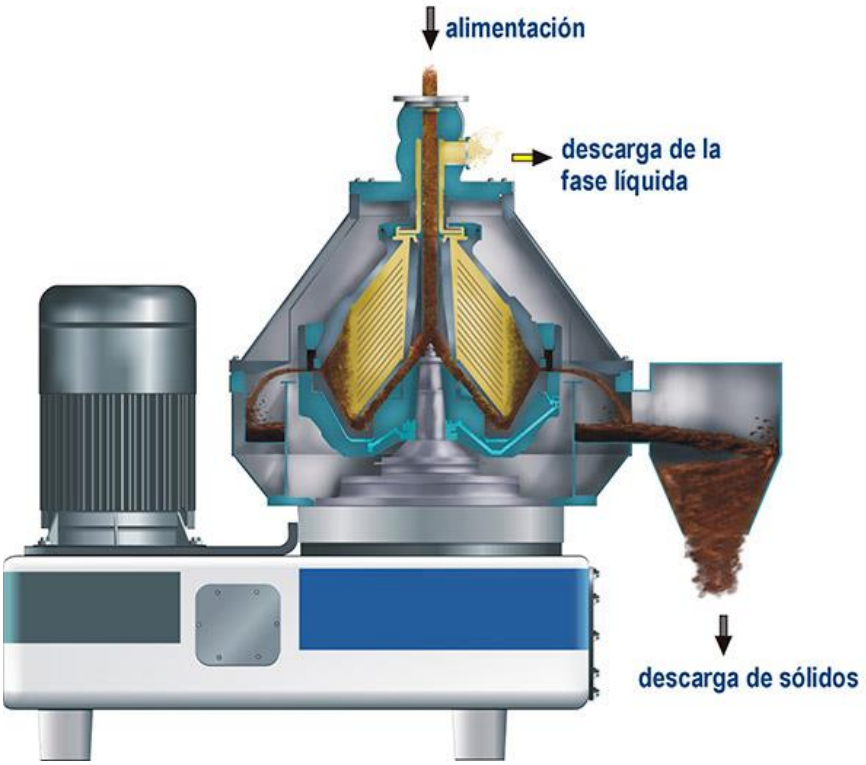


Figura 6. Esquema de funcionamiento de una centrifuga vertical

En esta fase tienen lugar procesos de transferencia entre las fases, es decir, se produce una migración del agua contenida en el aceite hacia el agua de adición a la centrifuga, a la vez que se separan los sólidos del aceite y se transfieren diferentes compuestos hidrosolubles presentes en el aceite hacia el agua de proceso. La efectividad de la máquina así como la calidad del aceite final están directamente relacionadas y van a depender de una serie de variables operativas que pueden ser reguladas y optimizadas.

Las variables más influyentes, sin duda, son la cantidad de agua a añadir (F_{wi}) para limpiar ese aceite durante la centrifugación así como la temperatura de la misma (T_{wi}). Para producir menos efluentes y evitar la pérdida de componentes bioactivos del aceite que son polares como los polifenoles se debe evitar añadir en exceso cantidades elevadas de agua. Un caudal elevado de agua añadido produce un lavado más intenso del aceite, obteniéndose aceites menos amargos, menos frutados y menos estables (Jiménez A., Hermoso, M., Uceda, 1995; Hermoso et al., 1998a). En estudios recientes,

se ha comprobado que la centrifugación vertical, con bajas dosis de agua, reduce el consumo de agua, reduciendo la emisión de contaminantes, sin perdidas de calidad de los aceites clarificados. No obstante se debe realizar un control más exhaustivo del aceite que entra en la centrifuga, ya que la cantidad de impurezas que lleve determina las descargas de limpieza de la centrifuga. De igual forma se deben realizar controles sobre las aguas de salida (Jiménez et al., 2014).

Así mismo, temperaturas elevadas pueden producir en el aceite pérdida de características organolépticas, compuestos volátiles y un descenso del contenido en polifenoles y estabilidad. Por tanto, durante esta etapa es esencial controlar la temperatura y la cantidad del agua adicionada, de acuerdo con la temperatura del aceite de entrada (Toi), aunque esa temperatura influya en la viscosidad del aceite y sea más fácil su separación (Jiménez A., Hermoso, M., Uceda, 1995; Hermoso et al., 1998a; Masella et al., 2009).

Actualmente se han llevado a cabo estudios de comparación entre diferentes sistemas de clarificación: decantación natural, a través de depósitos aclaradores, y centrifugación vertical, analizando su influencia en la calidad del aceite de oliva (Gila et al., 2016). Los resultados han permitido mostrar el efecto negativo en los aceites procedentes de la decantación estática en depósitos al compararlos con los obtenidos por centrifugación vertical, con escasa adición de agua (5%).

2.5 *Almacenamiento*

El aceite de oliva, como todos los productos cuya elaboración se concentra en unas fechas determinadas y el consumo se realiza durante todo el año, necesita ser almacenado de manera correcta. Después de todo el esmero puesto en el cuidado del fruto del campo hasta que se convierte en aceite de oliva, éste debe ser almacenado en óptimas condiciones durante varios meses conservando sus características originales y preservando su vida útil hasta su consumo (Alba, 2008; Uceda et al., 2008; Di Giovacchino, 2013). Una vez extraído y clarificado, el aceite de oliva virgen presenta

todavía una cantidad variable de humedad e impurezas de tamaño muy pequeño, llamada borras, que acaban decantando durante el almacenamiento. La cantidad de borras depende de la fase de clarificación y en menor medida de las condiciones de almacenamiento. Para una correcta conservación la bodega se han establecido una serie de requisitos que se deben cumplir, como paredes y techos de material aislante térmico para mantener una temperatura adecuada y uniforme de unos 15ºC a 18ºC a lo largo del tiempo que retarde los procesos de oxidación e hidrólisis; deben de ser de paredes que permitan una fácil limpieza; la luminosidad debe ser moderada; y debe estar separado de cualquier foco capaz de transmitir olores extraños (Alba, 2008). No sólo el almacén debe cumplir unos requisitos sino también los propios depósitos deben ser lo suficientemente buenos para preservar el producto. Por ello tiene que ser: de acero inoxidable, de tamaño adecuado para poder separar por calidades y no sobrepasar los 50tn, de forma cilíndrica para facilitar su limpieza; más altos que anchos para disminuir la superficie de contacto con el aire y la luz; impermeables, cerrados y de fondo cónico o inclinado para favorecer la decantación, acumulación de humedad e impurezas y posterior sangrado (Alba, 2008; Uceda et al., 2008).

Para evitar alteraciones del aceite se deben realizar purgas periódicas de borras, ya que éstas están formadas por agua, azúcar, proteínas y microrganismos, que unido a las condiciones anaeróbicas que se producen en el fondo del depósito, pueden dar lugar a fermentaciones no deseables produciendo olores y sabores extraños y deteriorando su calidad del aceite (Beltrán et al., 2012). Esta pérdida de calidad del aceite corresponde fundamentalmente a la reglamentada, aumentando la acidez, los peróxidos y la absorción UV durante el almacenamiento debido a los procesos oxidativos e hidrólisis que se producen debido a las borras (Tsimidou, 2006; Di Giovacchino, 2013;). De igual forma, el perfil sensorial de los aceites se ve afectado reduciéndose la intensidad de los atributos positivos y apareciendo otros negativos como ‘borras’, ‘rancio’, ‘avinado’, atributos relacionados con compuestos volátiles generados por los procesos oxidativos y fermentativos que ocurren durante el almacenamiento (Angerosa, 2003; Morales and Przybylski, 2013). Los compuestos bioactivos como fenoles, pigmentos y tocoferoles reducen su cantidad con el paso del tiempo disminuyendo así la estabilidad oxidativa del aceite (Tsimidou, 2006).

En base a esto, se han desarrollado diversos trabajos encaminados a eliminar o reducir dichos procesos deterioradores de calidad utilizando sistemas de purgado automático de borras (Beltrán et al., 2012) e inertización de los depósitos (Masella et al., 2010a, 2012).

3 Control del proceso de extracción del aceite de oliva

Debido a las exigencias y demandas del consumidor de productos de buena relación calidad/precio con las máximas garantías, se hace indispensable pensar en innovación y modernización del proceso industrial de elaboración del aceite de oliva virgen.

Con la transformación sufrida por el sector en la instalación de los sistemas continuos de extracción, la promoción de la investigación sobre la elaboración del aceite de oliva y la transferencia al sector de las buenas prácticas de elaboración eficiente, se ha incrementado el nivel medio de calidad de los aceites obtenidos (Uceda et al., 2006). A pesar de estos cambios, un buen control automático del proceso posee un gran margen de desarrollo.

Un proceso controlado es aquel en el que mediante la manipulación de un conjunto de variables permite obtener un producto final óptimo en la cantidad o calidad deseada. En el caso del proceso de elaboración del aceite de oliva virgen, como se ha visto en el apartado anterior, son muchas las variables que influyen en dicho proceso y como consecuencia, en las características físico-químicas y sensoriales del aceite final, así mismo en la extractabilidad y rendimiento del proceso. Estas variables son características de cada etapa del proceso y van desde las puramente mecánicas como son la velocidad de giro de los martillos del molino y el diámetro de criba, el punto en que la caña (L) descarga la pasta de aceituna en el decanter y la distancia a la que se sitúa respecto del eje de rotación (R_1); tecnológicas como la temperatura del fruto y de la pasta, el tiempo de batido, la adición de coadyuvantes, el caudal de alimentación de pasta al DCH, el agua de adición a dicha pasta, las temperaturas y caudales del aceite y del agua a la entrada a la CV; y analíticos como los parámetros reglamentados (acidez,

peróxidos, K_{232} y K_{270}) y los compuestos bioactivos (polifenoles, tocoferoles y pigmentos).

En la actualidad, la mayoría de las almazaras, bien gestionadas, realiza la optimización del proceso de elaboración del aceite de oliva mediante un control manual de las variables que lo regulan, cuyo resultado es un proceso poco ajustado, con pérdidas significativas de aceite en los subproductos y un escaso control sobre la calidad del aceite obtenido.

Con la introducción de sistemas SCADA (Supervisión, Control y Adquisición de Datos), a partir de los años noventa, ciertas variables del proceso, así como el funcionamiento de cada máquina (arranque, parada) y demás accesorios (bombas entre otros) pasan a ser controladas automáticamente. Mediante la instalación de sensores y actuadores (sensores de nivel, caudalímetros, sondas de temperatura, relés y contadores que abren y cierran circuitos de alimentación a equipos, válvulas de tres vías que controlan de la calefacción de las batidoras, electroválvulas que controlan la adición de agua, variadores de frecuencia de los motores y actuadores neumáticos y eléctricos para bombas, rotores..) integrados en el sistema, permite disponer de mayor información sobre las variables representativas del proceso. De acuerdo con la información recibida y las consignas del usuario, el programa modifica las variables del proceso actuando sobre los mecanismos de regulación (electroválvulas, válvulas automáticas…) hasta ajustar a las consignas preestablecidas.

Pero no todas estas variables aunque son influyentes son susceptibles de ser manipuladas en continuo, ni directamente. Por ejemplo, el grado de molienda, la caña de alimentación del decanter (DCH), así como la altura de salida de la fase oleosa supone tener que parar el molino y el DCH, respectivamente. El resto de variables se vienen cambiando y ajustando de forma manual a posteriori, en función de la experiencia adquirida por el maestro de almazara con los inconvenientes de falta de eficacia, eficiencia y control exacto del producto y subproductos producidos, en cuanto a calidad y extractabilidad.

En el control del proceso se han producido algunos avances, como la del control de la adición de agua al DCH y la automatización de la CV de bajo consumo de agua,

mediante la instalación de caudalímetros, válvulas y sensores analíticos. El procesador al que están conectados analiza la información, mediante las consignas incorporadas en el equipo da la respuesta al caudalímetro determinando la cantidad de agua a adicionar, pudiendo trabajar a diferentes dosis de agua, como por ejemplo se hizo en el estudio con bajas dosis de agua a la CV (Jiménez et al., 2014).

Esta regulación realizada normalmente, a posteriori tras conocer las características de dichos productos, depende de laboratorios externos que analizan posteriormente los parámetros físicos-químicos y sensoriales de dichos productos en base a métodos de referencia. El problema radica en el tiempo que tardan en aportar los resultados. Esta regulación no es efectiva pues cuando recibe el operario la información de parte del laboratorio, la aceituna ya no es la misma y las posibles regulaciones no corresponden con la aceituna a molturar en dicho momento.

Aprovechando las ventajas que los sistemas SCADA aportan (proporcionan información en tiempo real de los valores que toman distintas variables de trabajo, almacenar toda la información del proceso para su posterior análisis, añadiendo la posibilidad del manejo del sistema a distancia), se puede realizar la regulación y optimización del proceso de forma efectiva, basada en la información on-line de las características del fruto a procesar, así como del aceite final que se obtiene y el nivel de agotamiento conseguido. Con ayuda de sensores analíticos de medición en tiempo real (sistemas NIR) de los parámetros físico-químicos relacionados con la calidad objetivo del aceite a obtener, junto con los controles visuales (como fluidez del orujo, turbidez del aceite que sale del DCH, etc.) y las variables del proceso se puede realizar un control predictivo para una regulación a priori. Esto combinado con técnicas modernas de control de procesos, como las redes neuronales artificiales, conformarán un control moderno predictivo que puede permitir soluciones instantáneas, fáciles de aplicar, modificando y adecuando las diferentes variables para una optimización del proceso de producción en base a los objetivos marcados a priori.

4 Espectroscopia en el infrarrojo cercano (NIR)

4.1 *Uso de la tecnología NIRS en la industria oleícola*

La espectroscopia NIRS es una herramienta rápida y fácil de usar para la determinación de gran variedad de parámetros químicos en diversos productos en cualquier estado en el que se encuentren sólido, líquido o gaseoso sin tratamiento previo. Además se puede emplear de diferentes formas:

- *Off-line:* Cuando los equipos que analizan la muestra están ubicados en laboratorios externos a la línea de producción. De esta forma se eliminan errores de muestreo al tener las condiciones ambientales y de las muestras controladas aunque, el tiempo de análisis es muy elevado.

- *On-line:* el instrumento se conecta a la línea de proceso, analizándose las muestras en flujo contínuo sin llegar a interaccionar con ellas.

Debido a sus enormes ventajas, esta tecnología ha tenido un gran auge en entre las diferentes industrias para reducir costes y controlar de manera más exhaustiva sus procesos industriales a través de la información extraída de los espectros resultantes a través de potentes software. Además de no destruir ni interferir en la muestra esta técnica permite analizar diferentes componentes de diferentes productos en línea de producción con un bajo coste económico y fácil de usar. De este modo la industria que lo instala le es fácil y rápida de amortizar aunque su inversión sea alta (Williams and Sobering, 1993, 1996; Salguero-Chaparro and Peña-Rodríguez, 2014). Por ello cada vez más la industria oleícola está incorporando en sus investigaciones estos equipos, tanto en aceituna para la detección, predicción y cuantificación de diferentes parámetros de aceitunas intactas, ya sean aspectos físicos como magulladuras, picaduras de insectos y demás afecciones de la aceituna (Jiménez-Jiménez et al., 2013) o parámetros químicos del interior de la aceituna (contenido en humedad, contenido graso (Jiménez et al., 2000,2008,2009;Cayuela et al., 2009; Garcia and Léon, 2011; Salguero-Chaparro, L., 2014), acidez (Cayuela and Pérez-Camino, 2010; Cayuela Sánchez, 2012; Cayuela Sánchez et al., 2013; Salguero-Chaparro et al., 2013), firmeza, textura (Beghi et al.,

2013) y autentificación de la muestra a través de la identificación geográfica y originaria de la misma (Casale et al., 2010; Dupuy et al., 2010; Oliveri et al., 2013); como para el aceite de oliva para predicciones geográficas del aceite de oliva para evitar adulteraciones del aceite de oliva (Yang and Irudayaraj, 2001; Downey et al., 2002; Kasemsumran et al., 2005; Öztürk et al., 2010) y fraudes al consumidor o determinaciones rápidas de los parámetros de calidad (Endo et al., 1985; Hermoso et al., 1997;Jiménez Marquez, 2003; Mailer, 2004; Jiménez et al.,2005;Manley and Eberle, 2006;Armenta et al., 2007; Jiménez et. al.,2008; Inarejos-García et al., 2013) y estabilidad de los aceites (Cayuela Sánchez et al., 2013). Incluso en monitorización del proceso on-line (Jiménez et al., 2008,2009).

4.2 *Fundamentos de la Tecnología NIR*

La región del infrarrojo comprende el intervalo espectral de 750 nm a 1 mm. Según el fenómeno espectroscópico que provoca la absorción de energía por parte de la materia, podemos dividir esta región en tres zonas: infrarrojo cercano (NIR), la empleada en este trabajo, medio (MIR, 10 – 2.5 μm) y lejano (FIR, 10 μm – 1 mm). La absorción en el infrarrojo cercano, 750 a 2500 nm (12800-4000 cm^{-1}) están causadas por tres mecanismos diferentes. Los sobretonos de las vibraciones fundamentales que ocurren en la región del infrarrojo (4000- 300 cm^{-1}), las bandas de combinación de las vibraciones fundamentales que aparecen en la región del infrarrojo y las absorciones electrónicas como se observa en la Figura 7.

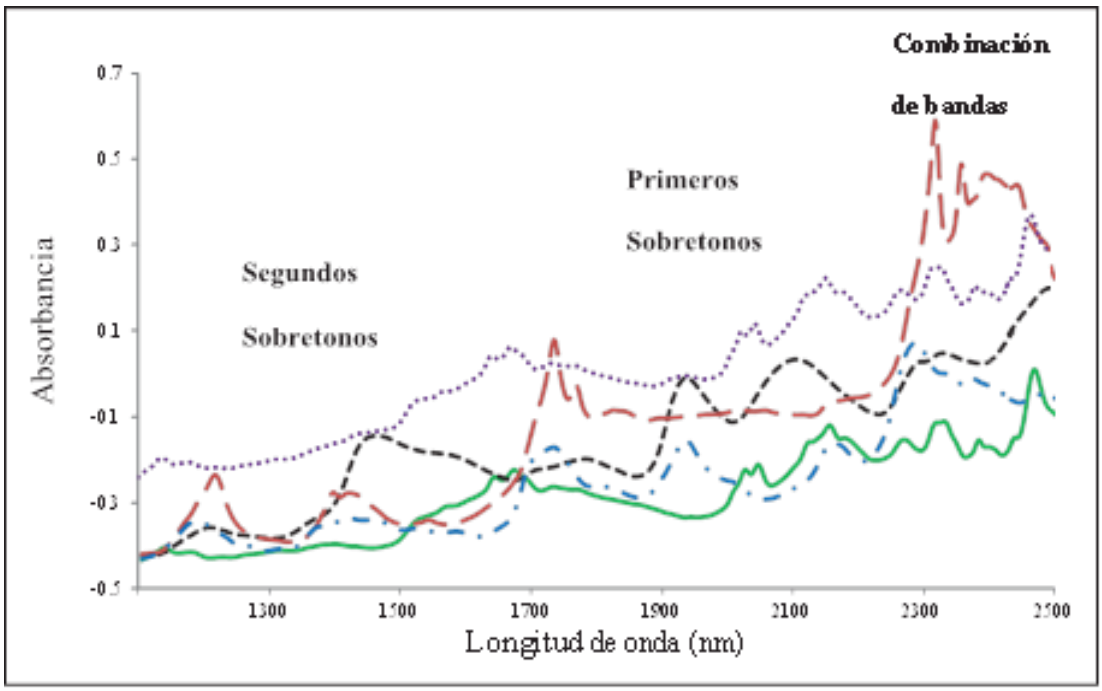


Figura 7. Ejemplo de espectro NIR (Fuente: Tesis doctoral(Cueva, 2012))

Los sobretonos se producen debido a que el comportamiento de las moléculas se acerca a un modelo del oscilador anarmónico en el que los niveles de energía no están homogéneamente espaciados. Por tanto, la diferencia de energía decrece al aumentar la frecuencia de la vibración del enlace que genera una banda de absorción en la región del infrarrojo. La anarmonicidad puede dar lugar a transiciones entre estados de energía vibracional. Estas transiciones entre estados vibracionales no continuos dan lugar a las bandas de absorción denominadas sobretonos (aunque en la práctica, y dependiendo del tipo de enlace, tan sólo el primer sobretono y el segundo presentan una probabilidad susceptible de ser observada).

Cuando en las moléculas poliatómicas dos o más modos vibracionales interaccionan causando cambios de energía simultáneos y generando bandas de absorción llamadas bandas de combinación. Las frecuencias de estas bandas son la suma de múltiplos de cada una de las frecuencias de interacción. En varias ocasiones en las bandas, las regiones de absorción aparecen como bandas anchas causadas por el solapamiento de multitud de absorciones diferentes.

Por último las absorciones electrónicas están causadas por el movimiento de los electrones desde una órbita a otra de mayor energía. Se observan normalmente en las

regiones del visible y el ultravioleta del espectro electromagnético, pero también pueden aparecer en la región del infrarrojo cercano, en particular en la región entre 780-1100nm.

Las transiciones no fundamentales son mucho menos probables que las correspondientes a transiciones entre niveles consecutivos, por lo que las bandas NIR son de intensidad menor que las que aparecen en la zona IR, además de ser anchas y no tan bien definidas como resultado del solapamiento de sobretonos y bandas de combinación.

Las bandas más frecuentes en NIR son debidas a enlaces que contienen átomos con diferencias de peso molecular importantes, de manera que se aumenta la anarmonicidad del enlace. El átomo de hidrógeno es el más ligero y por ello presenta las vibraciones más grandes y la mayor desviación del comportamiento armónico. Como consecuencia de esto, las principales bandas observadas en la región NIR corresponden con los enlaces en los que está implicado el hidrógeno u otros átomos ligeros (concretamente C-H, N-H, O-H y S-H); por el contrario, las bandas para los enlaces como C=O, C–C y C–Cl, son mucho más débiles o incluso ausentes (Figura 8).

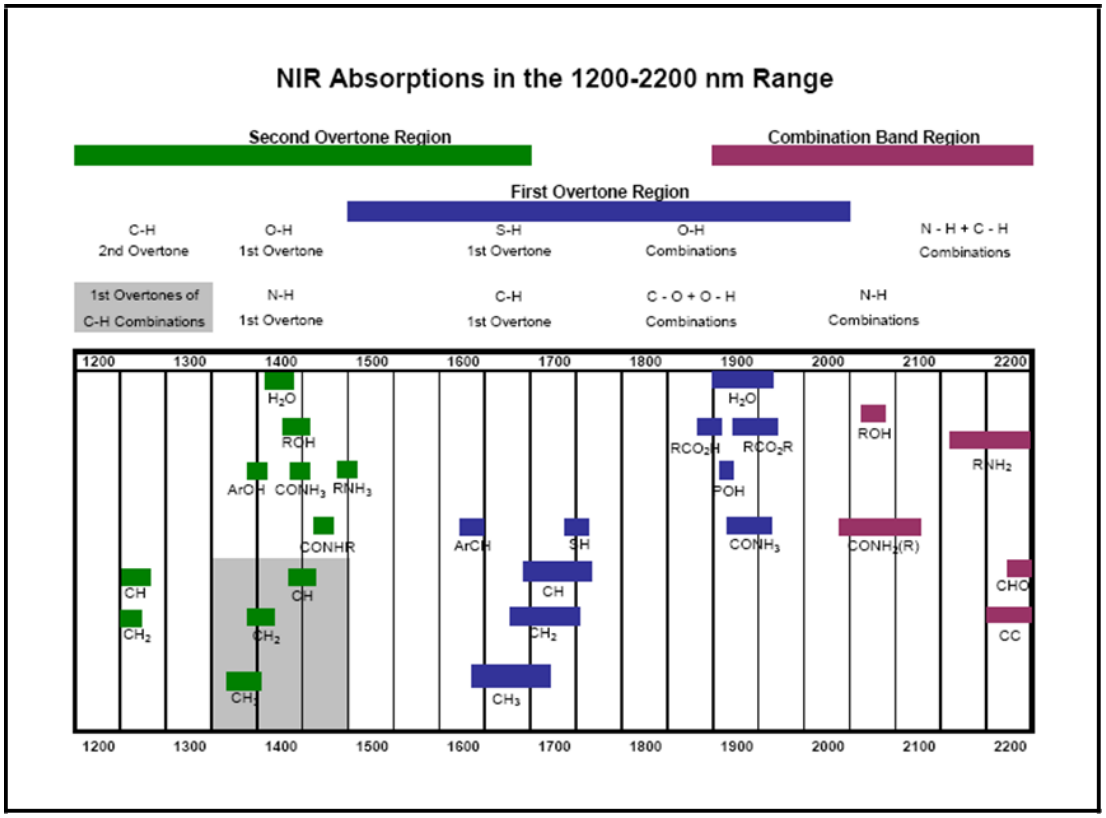


Figura 8. Asignación de bandas NIR a grupos orgánicos(Cueva, 2012).

Las interacciones entre átomos de diferentes moléculas (por ejemplo: los puentes de hidrógeno o las interacciones dipolo-dipolo) alteran los estados vibracionales de energía, generando desplazamientos en las bandas de absorción o dando lugar a nuevas bandas debido a diferencias en la estructura cristalina. Los puentes de hidrógeno se generan debido a la tendencia del hidrógeno a formar enlaces débiles con átomos dadores de electrones, especialmente oxígeno y nitrógeno. La formación de un enlace débil afecta a todas las vibraciones asociadas a ese hidrógeno y su compañero dador-electrónico. Esto se traduce en desplazamientos de bandas (hacia mayores y menos energéticas longitudes de onda) que se observan habitualmente como ensanchamiento de picos. La estructura del puente de hidrógeno del agua es muy compleja y depende de la temperatura, el pH, la concentración iónica, etc. Por tanto, siempre que el agua esté presente en una muestra existirá una compleja y dinámica interacción entre el agua y la muestra, que será única para ese tipo de muestra. En la Figura 9 sobre la base de un espectro de absorción en el infrarrojo cercano de una muestra de aceite de oliva, se señalan las zonas más características de aparición de las bandas de los sobretonos(A) y

de las bandas de combinación (B) de los grupos funcionales más comunes en productos agroalimentarios.

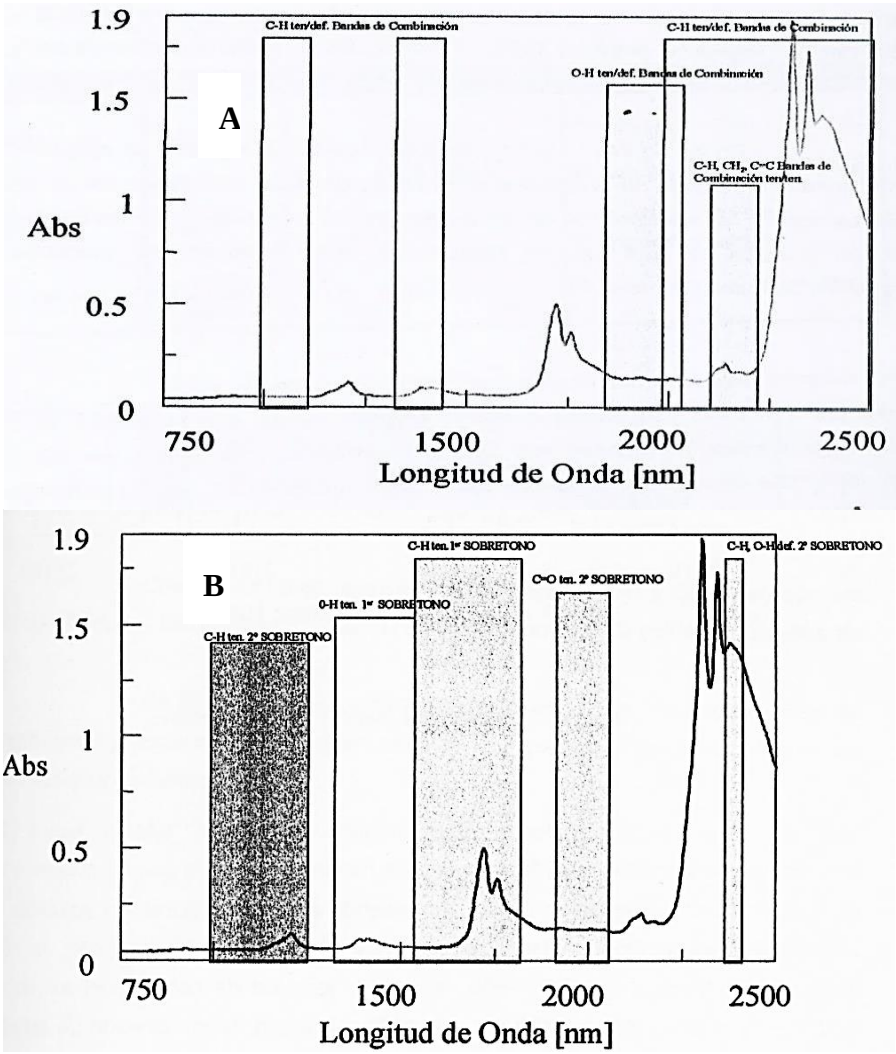


Figura 9. Zonas de sobretonos (A) y de bandas de combinación (B)(Jiménez, 2003).

En referencia a las grasas, Holman y Edmonson (1956), asocian los intervalos 2150-2190nm con las cis-insaturación, la zona 1600-1800nm con la cadena del esqueleto carbonado; la absorción a 1900nm con el 2º sobretono de la vibración de tensión del C=O del grupo carboxilo, las absorciones a 1420 y 2750nm con el grupo OH alcohólico y a 1460 y 2080nm con el OH de los hidropéroxidos (Holman, R.T. and Edmondson, 1956). Sato et al. (1991) añadieron a las aportaciones anteriores, la zona de 1600-1800nm, característica del primer sobretono de la vibración de tensión del enlace C-H que está asociada a la cadena carbonada, con información sobre el grado de insaturación

de los ácidos grasos mayoritarios y la zona 2100-2200nm con información acerca de la cis-insaturación (Sato et al., 1991). Takamura el al. (1995) sugieren el pico de absorción de 2084-2086 para los hidroperóxidos (Takamura et al., 1995). Chen y Chen (1995) aporta las bandas 1310-2390nm para la acidez, 1360, 1710, 2030 y 2080nm para los peróxidos y 1040, 1330, 1820 y 2410 para el grado de insaturación (Chen and Chen, 1995). Cho et. al(1998) asocian las bandas a 2080 y 2020nm con los hidroperóxidos (Cho et al., 1998).

El espectro NIR no solo contiene información química relacionada con la composición de la muestra, sino que también contiene información que puede ser utilizada para determinar determinadas propiedades físicas de las muestras. Los espectros NIR se presentan normalmente en unidades de absorbancia definidas por cualquiera de las expresiones A=Log(1/R) o A=Log(1/T), dependiendo de que los datos sean de reflectancia (R) o transmitancia (T) (Bokobza, 2002; Dufou, 2009).

4.3 *Instrumentación*

La baja intensidad de las bandas NIR, hace que el nivel de exigencia de los espectrómetros NIR, en términos de nivel de ruido permisible y estabilidad instrumental, deba ser mayor que en otros instrumentos, sobre todo si se pretende aplicar al análisis cuantitativo. Los componentes básicos de un equipo NIR son: fuente de radiación, sistema de selección de longitudes de onda, un sistema de lentes para enfocar la radiación, compartimento para la presentación de la muestra, detector que convierte la energía radiante en una señal eléctrica y un procesador de señal. Dicha señal, amplificada y convertida en una señal digital mediante un convertidor analógico/digital es finalmente transmitida a un ordenador para su almacenamiento o procesado (Bertrand and Dufour, 2000; Ciurczack, 2008; García-González et al., 2013). Las diferentes opciones para cada componente se muestran en la Figura 10.

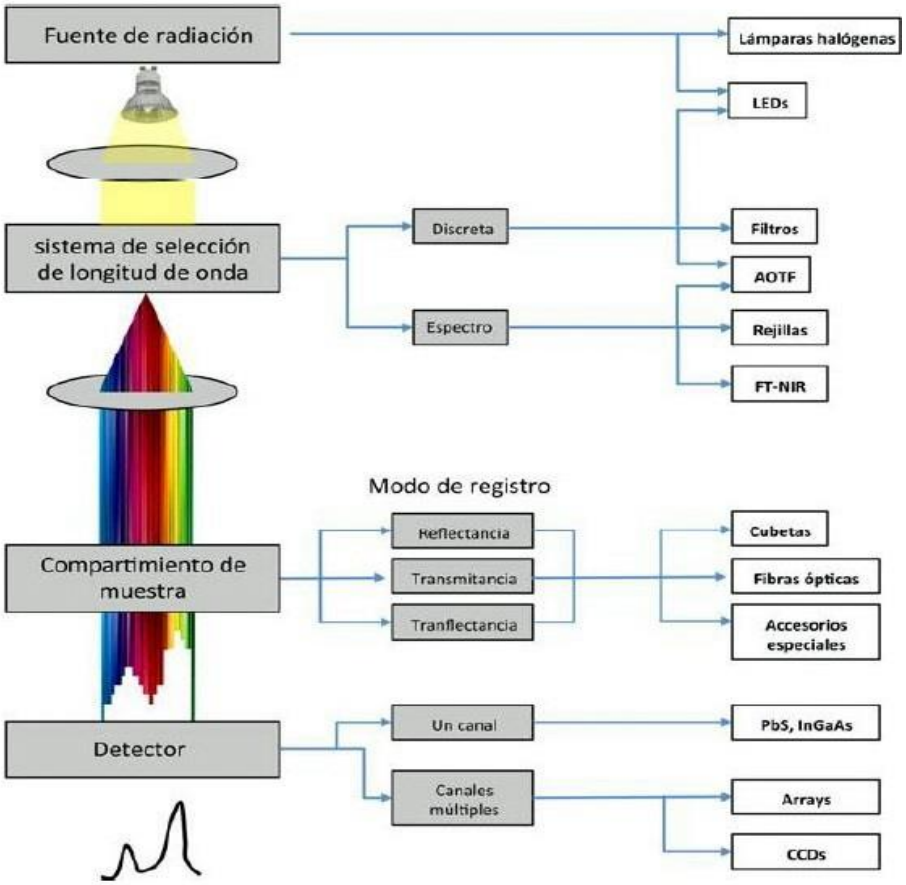


Figura 10. Características principales de un espectrofotómetro NIR(Monfort, 2014).

La fuente de radiación más usada es la lámpara halógena de filamento de tungsteno con ventana de cuarzo, capaz de proporcionar un espectro continuo en la región de 320 nm a 2500 nm, además de su buen funcionamiento, robustez y coste.

Para seleccionar la longitud de onda, se necesita un sistema con capaz de poder obtener un buen nivel de sensibilidad, que proporcione un ancho de banda preciso y exacto para la longitud de onda analítica y aportando señales altas a fin de conseguir una relación señal/ruido satisfactoria. En función del sistema utilizado para la selección de longitudes de onda, los instrumentos NIR pueden ser clasificados en sistemas dispersivos (monocromadores) o no dispersivos (filtros convencionales, filtros optoacústicos (AOTF, Acousto-Optic Tunable Filter) e instrumentos de transformada de Fourier (FT)). El sistema utilizado en este trabajo fue AOTF, Acousto-Optic Tunable Filter (AOTF). Los filtros optoacústicos aprovechan el cambio de índice de refracción del material con el que están construidos (TeO2) cuando éste es atravesado por una onda

acústica y dotando al material de capacidad para difractar ciertas longitudes de onda de un haz incidente (Figura 11).

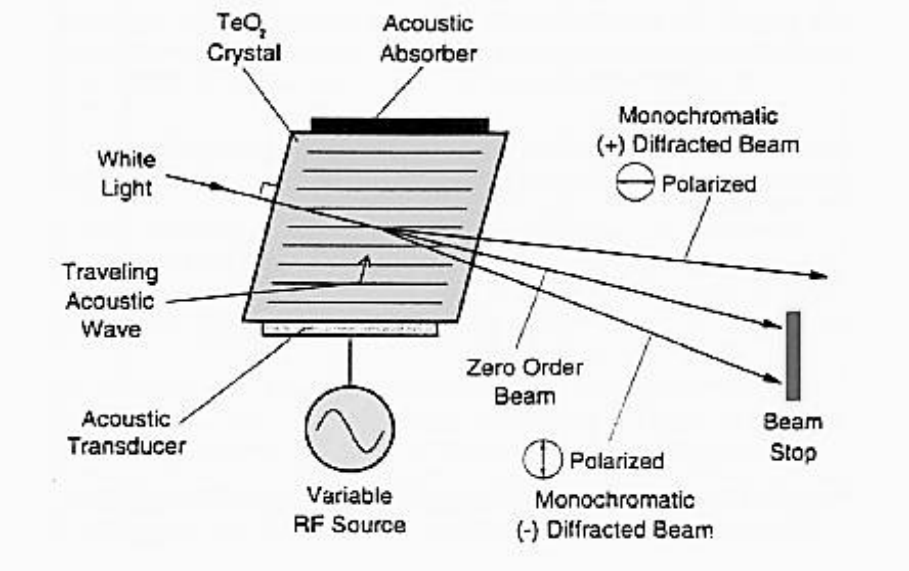


Figura 11. Sistema de filtros optoacústicos para la selección de longitudes de onda(Cueva, 2012).

Para la detección de la radiación NIR, existen varios tipos de detectores de diferentes características de acuerdo con su rango, sensibilidad, geometría, etc., construidos con semiconductores como InGaAs, PbS, InAs, InSb, Si... siendo el utilizado en este trabajo de Arseniuro de Indio y Galio (InGaAs) (Kawata, 2002;Blanco and Alcalà., 2005).

Debido a la existencia de múltiples módulos de medida, la espectroscopía NIR posee una gran versatilidad y adaptabilidad para el análisis de muestras de diversa naturaleza, ya sean sólidas, líquidas o gaseosas. De igual forma, de acuerdo con su instalación se pueden realizar medidas at-line, on-line y on-site, variando el camino óptico y el sistema de medida según la necesidad, mediante sondas de fibra óptica, con instrumentación portátil o fija, etc.

En función del tipo de muestra a analizar existen 3 tipos de registros de espectros NIR: transmitancia, reflectancia y transflectancia (Figura 12).

- En modo transmitancia se pueden monitorizar líquidos, semilíquidos y sólidos translúcidos. En este modo de medida, se debe elegir el tipo de cubeta que mejor se adecue a la muestra para ver el espectro de la muestra en unos niveles adecuados de

absorción y no tener saturación ya que el paso óptico está perfectamente fijado, por el que el haz de luz atraviesa la muestra hasta el detector.

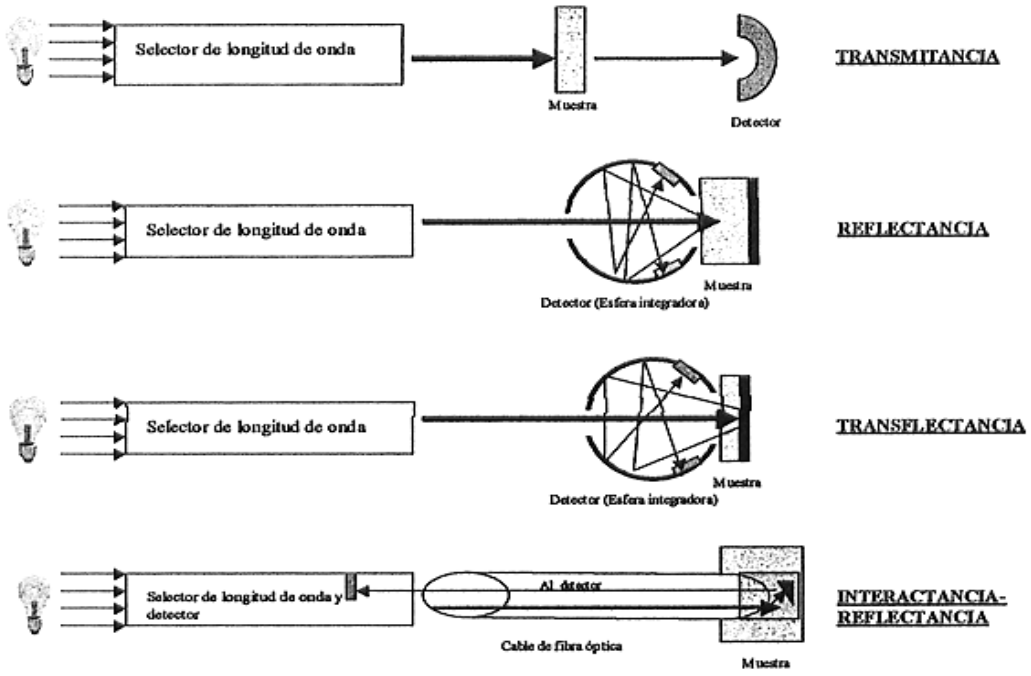


Figura 12. Tipos de registros de espectros NIR: transmitancia, reflectancia y transflectancia (Jiménez, 2003).

- En las medidas por reflectancia (sólidos y semisólidos), el haz de luz es reflejado por la propia muestra y el haz reflejado es recogido por el detector. La reflexión de la radiación puede ser especular(sólo aporta ruido) o difusa. Ésta tiene lugar en todas las direcciones como consecuencia de los procesos de absorción y dispersión, por lo que se emplean cubetas especiales (Kawata, 2002). La radiación reflejada por la muestra alcanza a los detectores, situados en el interior de una esfera integradora, tras numerosas reflexiones contra las paredes de la esfera, la cual está recubierta de un material reflectante difuso. Es utilizada para la determinación de proteínas, humedad, fibra y contenido en aceite en numerosos productos agroalimentarios y suele ser, la técnica más utilizada para el control de calidad 'on-line' de numerosos productos sólidos, semisólidos y pastosos.

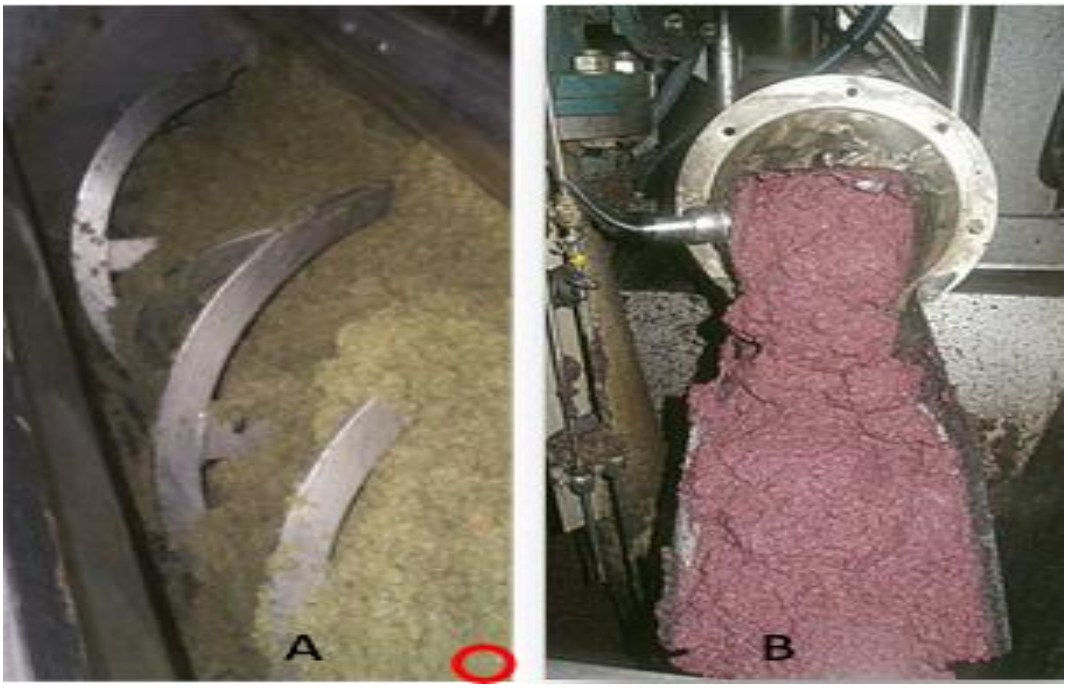
- Un caso intermedio lo ocupa las medidas por transflectancia (líquidos y semilíquidos). En este sistema, una delgada capa de muestra, que suele ser líquida o pastosa, es introducida en una cápsula cuyo fondo es una superficie reflectante; la radiación o radiaciones infrarrojas emitidas por la fuente penetran en la muestra, en la que una parte es absorbida para excitar los modos de vibración molecular y el resto atraviesa la muestra, produciéndose una nueva absorción de energía; la energía final transmitida es recogida en detectores como los utilizados en reflectancia.

- Interactancia-reflectancia. La radiación infrarroja es transmitida mediante una sonda de fibra óptica hasta el interior de la muestra, en donde es parcialmente absorbida por esta; el resto es reflejada retornando al equipo de medida por la misma fibra óptica, aunque por canales diferentes, hasta el detector.

4.4 *Adquisición espectral*

Para llevar a cabo un análisis cuantitativo, es necesario tener un conjunto de espectros con sus respectivos datos de laboratorio para poder relacionarlos mediante un tratamiento quimiométrico y obtener así modelos de calibración. Cuando se tiene una muestra cuya composición se quiere determinar, ésta se escanea para obtener el espectro y mediante la ecuación de calibración se obtiene el dato deseado. La tecnología NIRS permite hacer calibraciones para muchos productos y componentes, siempre que se disponga de análisis físico químico de referencia, precisos y confiables (Williams and Cordeiro, 1985)(Massat, D.L. et al., 1988). Además para realizar calibraciones robustas es necesario desarrollar y relacionar los datos cuantitativos con los espectros correspondientes durante varios años (Peirs et al., 2003, 2001) ya que las perturbaciones en los espectros que afectan la estabilidad en las predicciones de un modelo comprenden varios factores, tanto los asociados al procedimiento (ambientales y de operación) como los no asociados al procedimiento (diferentes operadores, instrumentos, etc).

En esta memoria, el escaneo fue realizado con un espectrofotómetro NIR de filtros optoacústicos (AOTF, Acousto-Optic Tunable Filter), dotado con un detector InGaAs y conectado por fibra óptica al equipo informático receptor y procesador de la información y a los diferentes sensores ópticos situados en sitios estratégicos en base a la muestra a escanear. Para la masa de aceituna se instaló a la mitad del primer cuerpo de la batidora, para conseguir la homogeneidad de la pasta; para el escaneo del orujo, el sensor se sitúo en la salida del mismo del DCH; para el mosto oleoso, el sensor estaba situado en el tubo de salida del mosto del DCH, antes del tamiz vibratorio; y el sensor para el aceite fue instalado a la salida de la CV, justo en el trasvase del primer tanque decantador al segundo tal y como indican la Figura 13.



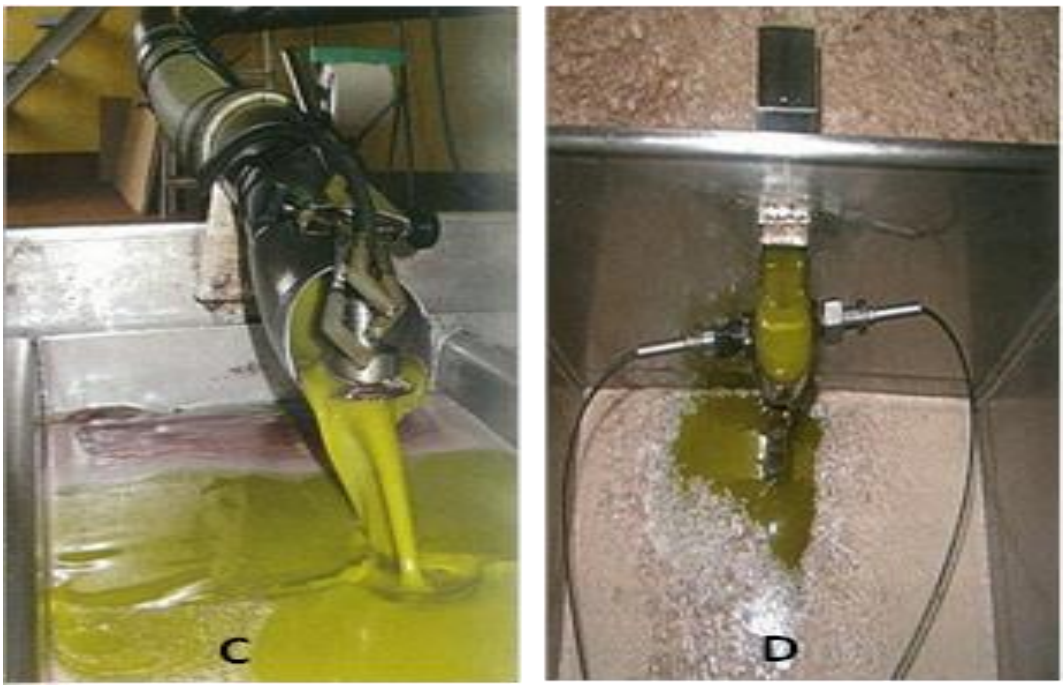


Figura 13. A) sensor situado en el primer cuerpo de la batidora; B) Sensor situado a la salida del orujo; C) Sensor para el escaneo del mosto oleoso a la salida del aceite en el DCH; D) Sensor para el escaneo del aceite a la salida del aceite de la CV.

En el escaneo de la masa de aceituna, orujo y mosto oleoso al ser en su mayor proporción base solida, semisólida, se realizó en modo reflectancia, influyendo en el espectro el contenido de grasa, humedad y temperatura que tengan. Así mismo, el aceite de oliva por su condición líquida se escaneó en modo de transmitancia. El contenido de agua y sólidos y la temperatura de la muestra de aceite influye en la turbidez, densidad y a su vez en la viscosidad de la muestra, esto genera información espectral con diferentes grados de intensidad y a distintas longitudes de onda. Este hecho da como resultado la obtención de diversos perfiles espectrales en función de cada materia a escanear. En la siguiente Figura 14 se aprecian los distintos tipos de espectros que pueden monitorizarse en los diferentes puntos de escaneo establecidos.

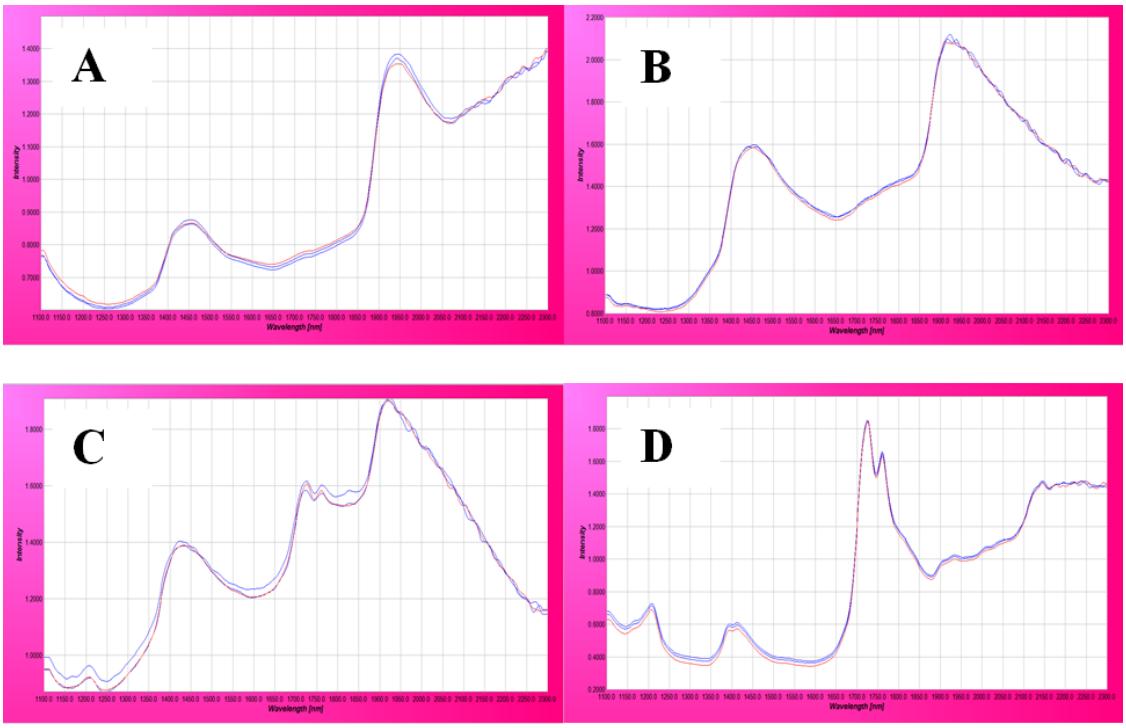


Figura 14. Espectro resultante del escaneo realizado on-line: A) a la masa de aceituna que pasa a través del sensor situado en el primer cuerpo de la batidora; B) al orujo de aceituna a través de un sensor situado a su salida del decanter horizontal; C) al mosto oleoso a su paso por un sensor situado ala salida del decanter horizontal, antes del tamiz vibrador; D) al aceite de oliva a su paso por un sensor, justo en el rebosadero del primer depósito decantador que posee la centrifuga vertical.

4.5 *Pre-procesamiento de los datos espectrales*

Una de las características de los espectros NIR es su complejidad, que les aporta la dificultad de ser interpretados y de realizar evaluaciones cuantitativas directas. Por ello, se hace imprescindible la utilización de técnicas quimiométricas multivariantes que nos permitan interpretar y entender el conjunto de datos extraídos de los espectros. La quimiometría puede ser definida como la parte de la química que, utilizando métodos matemáticos, estadísticos y de lógica formal a) diseña o selecciona procedimientos de medida óptimos y b) proporciona la máxima información relevante de los datos analíticos (Massat, D.L. et al., 1988). La quimiometría cuantitativa exige una serie de pasos hasta llegar al modelo de calibración, y en el caso de empleo de señales espectrales como fuente de información, adquiere especial relevancia el análisis de

éstos, previo a su uso, en una primera etapa conocida como ‘pre-procesamiento espectral’.

El objetivo de esta etapa es:

- detectar datos espectrales anormales, ya que éstos son muestras que se apartan del promedio global del conjunto total de muestras por diferentes razones, pueden interferir en la capacidad de predicción de los modelos creados.

- corrección de la señal espectral ya que los espectros contienen mucha información y deben someterse a un conjunto de tratamientos para poder trabajar con ellos, con el fin de conseguir disminuir variaciones aleatorias y sistemáticas del espectro creadas como consecuencia de efectos físicos de dispersión de la luz, ruido, derivas, desplazamientos, de esta forma se podrá construir modelos más robustos y sencillos. El ruido puede tener diferentes causas u orígenes, por lo que puede afectar de forma distinta al espectro. Puede haber ruido debido a los componentes de la instrumentación utilizada para el registro del espectro (ruido instrumental), debido a variaciones de temperatura, humedad u otras condiciones ambientales durante el registro (ruido ambiental) o bien variaciones en la señal debidas a la propia naturaleza de la muestra. Por ellos se debe de realizar un pretratamiento que intenta corregir determinadas tendencias en la línea base que aportan ruido a la señal y normalizar la línea base para corregir el efecto de dispersión producido por el tamaño de partícula de muestras sólidas que producen diferencias espectrales. De esta manera se minimiza variaciones de desplazamiento de la línea base y se asigna el mismo peso a cada muestra corrigiendo sus diferencias de intensidades. Para ello se resta a cada variable obtenida, absorbancia, del promedio y dividir el valor entre la por las desviación estándar. Esta normalización debe aplicarse conjuntamente con otro método para su corrección.

- reducir la dimensionalidad a las zonas de interés cuantitativo

Los tratamientos más habituales (y empleados en ésta memoria) suelen ser:

- PCA

La detección de muestras anómalas y su posterior clasificación es muy importante, pues se puede tratar de muestras que pertenezcan a algún tipo de variedad distinta a las demás, de un espectro que hemos realizado con el equipo NIR sin estabilizar o averiado, de una muestra con una concentración fuera del rango seleccionado para la calibración, etc., observaciones atípicas en las muestras utilizadas y que pueden influir en la creación de un modelo aportando datos erróneos que van a derivar a modelos erróneos y/o de baja capacidad predicativa. Una observación atípica son las que parecen ser inconsistentes o discordantes con respecto al resto de observaciones que se encuentran en una muestra (Barnett and Lewis, 1994). La clasificación de estos conjuntos se hace representando cada muestra en un espacio multidimensional que representa los puntos de datos adquiridos. Dicha representación matemáticamente es muy compleja, por lo que aplicamos técnicas de representación en componentes principales PCA para poder realizar el método de la distancia de Mahalanobis y eliminar los datos anómalos. A partir de un elevado número de variables originales interrelacionadas, permite extraer información relevante, reduciendo el número de variables del problema mientras que tiende a desechar el ruido contenido en las variables originales. Por lo tanto, PCA transforma las variables originales o medidas (datos espectrales obtenidos para cada longitud de onda en el caso analizado) en un conjunto de variables latentes, llamadas componentes principales (PCs), perpendiculares entre ellos. Los PCs se obtienen a partir de combinaciones lineales de las variables originales. El primer PC (PC1) explica la máxima variabilidad de los datos, el segundo (PC2) que es perpendicular al primero, explica la máxima variabilidad residual. Ello indica que los PCs obtenidos se alinean en la dirección de máxima variabilidad de los datos en el espacio de las variables originales.

Una vez realizado el PCA se puede utilizar el método de la distancia de Mahalanobis (Fernández Pierna et al., 2002) para detectar y eliminar estos datos atípicos conocidos como ‘outliers’. Esta técnica esta basada en la proximidad y se define como la distancia entre un punto de los datos y el centroide de un espacio multivariado para identificar

valores atípicos. Es la distancia *D* entre dos puntos definidos por los vectores *x* e *y* que está afectada por la matriz de la covarianza *S*. $D(\vec{x},\vec{y}) = \sqrt{((\vec{x}-\vec{y})S^{-1}(\vec{x}-\vec{y}))}$

Una medida de la variación de cada muestra no capturada por los componentes principales retenidos en un modelo que viene dada por el estadístico T^2 de Hotelling que define la distancia de una observación al punto de funcionamiento medio y cuyo nivel de confianza es del 95%. Una vez definido el modelo de PCA, emplean el estadístico T^2 de Hotelling y el estadístico Q para identificar las medidas fuera de control. El estadístico Q representa la distancia de Mahalanobis de una muestra al espacio definido mediante un análisis de componentes principales (PCA), por lo que determina la magnitud de los residuos y con ello cuánta variación de la muestra no es explicada por el espacio de componentes principales definido (Martens and Naes, 1989). Los datos anómalos se eliminan mediante las distancias D de Mahalanobis, ya que pueden disminuir la capacidad de predicción del modelo (Fernández Pierna et al., 2002, 2003; García-González et al., 2013). Este tratamiento fue realizado usando el programa 'The Unscrambler 9.7.

- Suavizado y reducción de la dimensionalidad.

La reducción de la dimensionalidad es empleada para la extracción de variaciones en las características espectrales debidas a un efecto de interés o para la corrección de variaciones debidas a efectos físicos o químicos no relacionados con las propiedades de interés. Esta reducción de dimensionalidad es muy empleada cuando la matriz de datos contiene un mayor número de muestras que de variables, como es el caso de la regresión multivariante. Además permiten comprimir la dimensión del espacio de predicción de forma selectiva definiendo un subespacio que contenga variaciones principalmente relacionadas con la variable de interés. Para ello, se aplican técnicas de suavizado, entre las que se han aplicado en el presente estudio: el tratamiento 'Moving Average' y el tratamiento 'Transformada Wavelet'. La idea central es definir a partir de la serie observada un nueva serie que suavice los efectos ajenos a la tendencia (estacionalidad, efectos aleatorios), de manera que se pueda determinar la dirección de la tendencia.

Moving Average

El tratamiento moving average significa, en estadística, media móvil, es un cálculo utilizado para analizar un conjunto de datos en modo de puntos para crear series de promedios. Así las medias móviles son una lista de números en la cual cada uno es el promedio de un subconjunto de los datos originales. Una serie de medias móviles puede ser calculada para cualquier serie temporal. Se usa para demanda estable, sin tendencia ni estacionalidad; suaviza las fluctuaciones de plazos cortos, resaltando así las tendencias o ciclos de plazos largos.

Utiliza como pronóstico para el siguiente período, el promedio de los "n" valores de los datos más recientes de la serie de tiempo. El término móvil indica que conforme se tenga disponible una nueva observación de la serie de tiempo, se reemplaza la observación más antigua en la ecuación y se calcula un nuevo pronóstico. Como resultado el promedio se modificará, a medida que se agreguen nuevas observaciones.

La variable n es una indicación de cuantos períodos habrán que tomarse para calcular el promedio, generalmente suele variar entre tres (3) a seis (6), dependiendo de cuantos elementos tiene la serie de datos. Así, en este caso estudio se usó la Media Móvil de Orden 6, la cual se construyo promediando los seis últimos datos. Este tratamiento fue realizado usando el programa 'The Unscrambler 9.7.

La principal ventaja que presenta esta media móvil será que no retrasará tanto la evolución de la variable como lo hacía la media móvil anual, ya que al no utilizar tantas observaciones, su comportamiento se asemejará más al de la serie original. Sin embargo, el principal inconveniente de esta media móvil viene precisamente de esa menor utilización de observaciones. Al no construirse con 12 observaciones, no se elimina completamente el componente estacional, llegando en ciertos casos a multiplicarse este efecto (Ozaki et al., 2007).

La transformada mediante ‘Wavelet’ (WT)

A través de las transformaciones de Wavelet se pueden reducir la dimensionalidad mediante la eliminación de variaciones no informativas mejorando la capacidad predictiva de los modelos. Estas transformadas se emplean como métodos de pre-procesado anteriores a la regresión multivariante (Zeatier and Rutledge, 2009).

El Tratamiento ‘Wavelet’ descompone una matriz espectral que es la matriz madre a la que se le agregan un par de variables permitiendo hacer dilataciones y contracciones de la señal y la variable de traslación, y así mover la señal en el tiempo modificando su localización y su frecuencia (mediante el escalado). Una función Wavelet se caracteriza por el llamado momento de desvanecimiento que nos permite conocer la forma de la *wavelet* y saber que tan hábil es la *wavelet* para suprimir un polinomio dado. La suavidad de la *wavelet* esta limitada por el número de momentos de desvanecimiento que tenga que es igual al orden de la *wavelet*. Existe un gran número de familias de funciones de Wavelet ortogonal, aunque la más usada es la ‘Daubechies’, siendo la empleada en este trabajo ‘Daubechies nivel 4’, pasando de 526 a 39 puntos espectrales.

Empleando este tratamiento como método de pre-procesado para espectros NIR es posible conseguir la compresión sin apenas pérdida de información, mejorando así la capacidad predictiva de los modelos diseñados. Este tratamiento fue realizado usando el programa Matlab 7.10.0.499 (R2010a); The Math Works, Natick, MA)

- Derivadas para normalizar la línea base y corregir la señal.

El uso de derivadas en espectroscopia NIRS permite disminuir los problemas más característicos: solapamiento de bandas y variaciones de línea base aumentando las diferencias entre las bandas anchas. La primera derivada minimiza diferencias de desplazamiento de la línea base eliminando los términos constantes a todas las longitudes de onda y la segunda derivada minimiza diferencias de pendiente. La aplicación de las derivadas permite un aumento de la resolución de bandas, pero por contra aumenta el ruido, por ello se recomienda realizar un suavizado de la señal antes de la diferenciación de los datos. El cálculo de estas derivadas se realiza de acuerdo con Savitzky y Golay, aunque también se puede realizar solo la primera derivada según el

método propuesto por Norris. El método de Savitzky-Golay consiste en ajustar un pequeño intervalo de longitudes de onda a un polinomio de grado adecuado para poder trabajar con los datos sin que interfiera el ruido que les pudiera afectar (Savitsky A, 1964).

Hay que considerar que en ocasiones los modelos de calibración obtenidos con datos a los que han sido aplicadas derivadas son menos robustos y hay que revisar con frecuencia las calibraciones.

4.6 *Desarrollo de modelos de cuantificación.*

La base de datos empleados para el desarrollo de modelos de cuantificación está formada por datos espectrales, datos de control de proceso y datos analíticos. Estos datos son obtenidos de diferentes ensayos realizados durante varias campañas agrícolas en la almazara industrial experimental situada en el IFAPA, Venta del Llano, conformada por una línea continua de dos fases. En cada ensayo, comprendido por la molturación de la aceituna y transformación en aceite, se obtuvieron unos datos espectrales tras el escaneo de la masa de aceituna, del orujo, del mosto oleoso y del aceite a través de los sensores mencionados anteriormente y conectados al sistema AOTF-NIR. Conjuntamente y durante el desarrollo del ensayo se obtuvieron datos de control de proceso (variables mecánicas y tecnológicas) y datos analíticos a través del posterior análisis en laboratorio de las muestras de aceituna, orujo, mosto oleoso y aceite, desde la extractabilidad del proceso, contenido graso y húmedo del orujo, como los principales parámetros regulados del aceite y sus componentes bioactivos.

Los datos analíticos, los datos de control del proceso y los datos espectrales (tras su pretratamiento espectral correspondiente) de todos los ensayos realizados en las diferentes campañas agrícolas estudiadas, constituyen una base de datos lo suficientemente grande como para aportar una gran variabilidad tanto en las muestras, para todos los componentes presentes en ellas, como en las diferentes combinaciones de las variables de proceso. (Snee, 1977).

Dicha base de datos se dividirá en el conjunto de calibración y el de validación que deberán comprender muestras uniformemente distribuidos en un rango mayor que el de las muestras que serán analizadas por el modelo. Para esto se necesitan buenos datos experimentales así como modelos estadísticos adecuados. Existen diferentes estrategias para la selección de conjuntos de datos adecuados para la calibración. Normalmente cuanto mayor es el número de muestras utilizado en la calibración, mejor es la capacidad predictiva del modelo y menor el error de predicción. En esta memoria al disponer de un gran número de datos fiables se dividieron en dos grupos: uno mayoritario (conjunto de calibración) empleado en la construcción de los modelos de predicción y otro minoritario empleado para la validación del modelo obtenido comprobando su exactitud y precisión.

El proceso de calibración permite establecer la relación entre la respuesta instrumental y la propiedad a determinar, utilizando a tal efecto un conjunto de muestras representativas. La espectroscopia NIR proporciona un gran número de variables respuesta para cada muestra, variables que en general no pueden ser asignadas a un solo analito. Esto ha propiciado el desarrollo de métodos de calibración capaces de relacionar múltiples variables con la propiedad a determinar. Estos métodos son conocidos como Métodos de Calibración Multivariables (Figura 15).

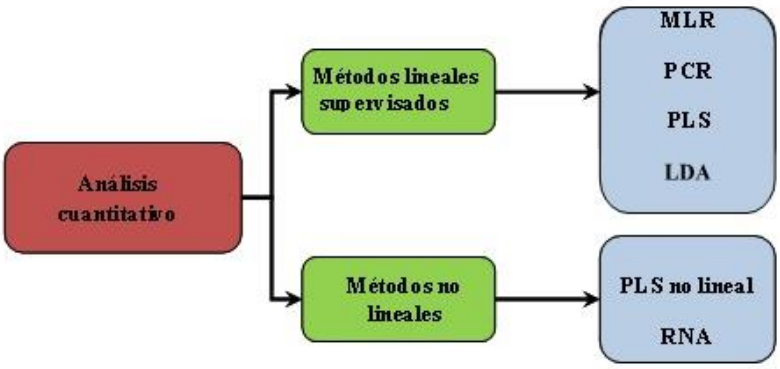


Figura 15. Clasificación general de los métodos de calibración multivariables

Métodos lineales

- *Regresión Lineal Múltiples, MLR* (con una función de un número reducido de longitudes de onda o variables)

- *Regresión por Componentes Principales, PCR* (los datos espectrales son tratados con PCA y los resultados obtenidos se consideran las variables predictoras en un MLR)

- *Regresión de Mínimos Cuadrados Parciales, PLS* (persigue una matriz de entrada cuyos componentes contemplen las variaciones de las variables de entrada, al mismo tiempo que tengan la máxima correlación con la variable respuesta)

- *LDA,* LDA está estrechamente relacionado con el análisis de varianza (ANOVA) y el análisis de regresión, el cual también intenta expresar una variable dependiente como la combinación lineal de otras características o medidas.

Métodos no lineales

- *PLS-no lineal* (utilizado en fenómenos no-lineales)

- *Redes Neuronales Artificiales, RNA* (explicadas a continuación en el siguiente apartado).

Una vez generado el modelo de calibración, éste debe ser validado. Hay diferentes formas de validación:

- *Validación cruzada o cross validation.* El proceso de validación se realiza al mismo tiempo que durante la obtención del modelo, para ellos se extraen un número de datos del conjunto de calibración y una vez obtenido éste, se predicen los valores de estas muestras extraídas, obteniéndose los correspondientes residuales de la predicción. Este proceso de extracción se repite sucesivamente

hasta que todos los datos han sido extraídos una vez, combinándose, entonces, todos los resultados de predicción y estimando los correspondientes estadísticos de calibración-validación. Existen diferentes tipos de validación cruzada (cruzada de K iteraciones, aleatoria o cruzada dejando uno fuera).

- *Leverage*. Cuando una muestra presenta un perfil espectral claramente diferente del perfil medio, esta puede tener una gran influencia en la construcción del modelo de calibración, esta influencia puede ser cuantificada a través del parámetro 'h' (leverage), que representa la distancia de la muestra respecto del centroide que forma el conjunto de calibración. Es un método rápido para simular la validación de un modelo sin tener que realizar predicciones reales. Se basa en la suposición de que las muestras con un 'h' elevado serán más difíciles de predecir con precisión que las muestras más centrales, estimándose, para ello, una varianza residual de validación con las muestras de calibración mediante empleo de un factor de corrección que aumenta con el valor 'h' de la muestra.

- *Test-set.* El proceso de validación de un modelo se realiza empleando un conjunto de muestras no usadas en la construcción del mismo. Es el procedimiento más exacto ya que con el se avalúa la capacidad predictiva real de los modelos ante situaciones futuras con muestras desconodidas.

Los estadísticos espleados, tanto en calibración como validación para seleccionar las mejores ecuaciones de prediccción se tuvieron en cuenta los valores más bajos del error típico residual para el colectivo de calibración (RMSEC), para el de validación cruzada (RMSECV) y el error de predicción (RMSEP), así como los valores más elevados de los coeficientes de determinación en calibración (R^2) y en validación (r^2) y los valores de los índices RPD y RER(Wu et al., 2010).

Los valores RPD (Residual Predictive Deviation) fueron calculados como indicadores de calidad del modelo para evaluar la precisión y exactitud de los modelos, siendo $RPD = \frac{SD}{RMSEV}$ SD la desviación estándar de la variable respuesta. Con valores por encima de 3, el mínimo recomendado (Williams and Sobering, 1996), se confirman una elevada precisión de las calibraciones desarrolladas. Si el valor se encuentra entre 2,5 y

3 la calibración es buena y si se encuentra entre 2,5 y 2 la calibración es aceptable para análisis cuantitativos y cualitativos respectivamente. De igual forma, los valores RER (Relative Range Error) referentes a la relación entre el rango del conjunto de validación y el SEP indican la calidad del modelo cuando son superiores a 10 (Williams and Sobering, 1996).

Además, para determinar la existencia de diferencias significativas entre los valores predichos por la red neuronal y los valores reales obtenidos en laboratorio y evaluar la precisión y exactitud de los modelos creados se realizó un t_e-Student para comparación de medias, con un intervalo de confianza del 95%, calculándose la desviación estándar del sistema o varianza conjunta. Sí se cumple que $t_{exp}<t_{teor}$ (α=0.05 de nivel de significancia), se puede decir que no hay diferencias significativas estadísticamente entre las medias obtenidas por ambos métodos.

5 Redes Neuronales Artificiales

Durante las últimas décadas se han ido desarrollando diversas investigaciones en el área de la inteligencia artificial para conseguir implementar nuevas tecnologías con capacidades cercanas a las del ser humano en diferentes ámbitos de trabajo. Todo ello con el fin de dar solución a problemas complejos de solucionar con un simple algoritmo en ciencias cognoscitivas, neurobiología, ingeniería de computadoras, procesado de señales, industrias, óptica y física.

Basados en el funcionamiento del sistema nervioso humano, las investigaciones emulan la forma de trabajar de las redes neuronales biológicas para aplicarlas a innumerables variedades de problemas donde principalmente se trata de aprender, razonar y tomar decisiones con base en lo aprendido, valiéndose de la clasificación de patrones y/o la aproximación de funciones. La aplicación que en este caso nos interesa es la de control, modelado y monitorización de procesos industriales de cualquier sector, para conseguir optimizar el proceso y así reducir costes. En este sector, las redes neuronales artificiales tienen diferentes aplicaciones tanto en aceituna para clasificar la aceituna para su

procesamiento o probar el estado de madurez de los frutos, como para detectar los fraudes o adulteraciones en los aceites de oliva o predecir las características del aceite de oliva obtenido y optimizar el proceso de extracción.

Por ejemplo, las redes neuronales, concretamente el perceptrón multicapa (MLP) demostró ser un instrumento práctico y eficaz para la clasificación de aceitunas según variedades de olivo, como una herramienta para garantizar la autenticidad varietal y evitar así posibles adulteraciones de aceite de oliva con aceitunas de variedades no permitido, según la Denominación de Origen Protegida (DPO) o del aceite de oliva monovarietal de regulación oficial (Peres et al., 2011).

Por otra parte, con el algoritmo de Levenberg-Marquardt FFBP fue utilizado para predecir la cantidad de aceite en comparación con modelos de regresión lineal (MLR) (Ram et al., 2010). Otros autores se unieron a la clasificación de los aceites de oliva virgen extra (EVOO) utilizando ANN. Esta clasificación utilizaba como entrada varios parámetros, tales como la acidez, índice de peróxido, K_{232}, K_{270}, ΔK, humedad y compuestos volátiles y comprobaba como modelos de RNAs de topologías pequeñas podían clasificar muestras EVOO además de detectar adulteraciones (Aroca-Santos et al., 2015; Torrecilla et al., 2015). En la misma línea, se utilizaron RNAs para clasificar los aceites de oliva a partir de ocho ácidos grasos de los aceites de oliva italianos (Zupan et al., 1994) y se crearon mapas auto-organizados (SOM) para identificar muestras adulteradas (Marini et al., 2007).

Dentro del proceso de extracción del aceite de oliva también se han realizado diversos trabajos cuyo instrumento fundamental son las RNAs. Así pues en diversos trabajos se crearon modelos de redes neuronales para la predicción del nivel de acidez y peróxidos del aceite de oliva obtenido mediante un continuo proceso de extracción (Furferi et al., 2007, 2008, 2010)o para estimar la concentración de compuestos fenólicos en las aguas residuales del proceso de extracción de aceite de oliva, un contaminante con un alto impacto ambiental (Torrecilla et al., 2007, 2008).

En otros trabajos se construyeron una ANN de predicción en tiempo real de la humedad y el contenido de grasa en el aceite de orujo de oliva mediante dos fases de procesamiento del aceite de oliva. Con ayuda del sistema AOTF-NIR que se obtiene el

espectro de aceite del decantador horizontal y el análisis de datos, se desarrollo una ANN basado sobre la BPFF. Estas predicciones pueden realizarse rápidamente durante el proceso de extracción, lo que permite una regulación rápida de las variables tecnológicas para minimizar la pérdida de grasa(Jiménez et al., 2008; Jiménez Marquez et al., 2009). Del mismo modo se usaron las redes para predecir las características del aceite obtenido a partir del análisis de las aceitunas (Allouche et al., 2015).

5.1 *Fundamentos y similitudes de las RNA´s*

Las redes neuronales son más que otra forma de emular ciertas características propias de los humanos, como la capacidad de memorizar y de asociar hechos. Algunos problemas no pueden expresarse a través de un algoritmo, pero tienen una característica en común: la experiencia. Una red neuronal es "un nuevo sistema para el tratamiento de la información, cuya unidad básica de procesamiento está inspirada en la célula fundamental del sistema nervioso humano: la neurona". Las redes neuronales artificiales tienen como objetivo ejecutar la misma tarea de reacción que aquellas redes neuronales naturales, esto con el fin de simular los procesos cerebrales en aplicaciones prácticamente en cualquier área. Al igual que en el proceso biológico, una RNA debe ser entrenada y aprender.

Las RNA´s son estructuras compuestas por capas de nodos (neuronas) conectados en diferentes configuraciones que dan una respuesta en una capa de nodos de salida ante una determinada entrada en una capa de nodos de entrada.

Como se aprecia en la Figura 16, cada neurona consta de una serie de entradas Xi (x_1, x_2,…x_n), que equivalen a las dendritas de donde reciben la información en forma de estimulación. Los pesos que hay en las sinapsis W_i, equivaldrían en la neurona biológica a los mecanismos que existen en las sinapsis para transmitir la señal. De forma que la unión de estos valores (X_i y W_i) equivalen a las señales químicas inhibitorias y excitadoras que se dan en las sinapsis y que inducen a la neurona a cambiar su comportamiento. Estos valores son la entrada de la función de ponderación o red que

convierte estos valores en uno solo llamado típicamente el potencial que en la neurona biológica equivaldría al total de las señales que le llegan a la neurona por sus dendritas.

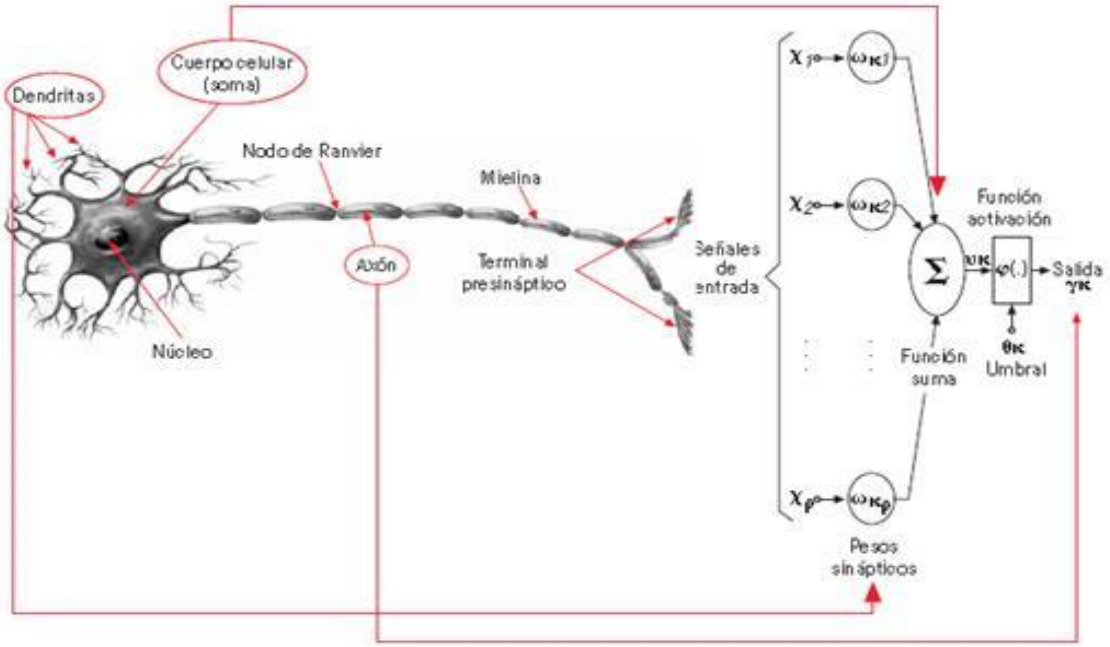


Figura 16. Similitud entre una neurona biológica y una neurona artificial

La función de ponderación suele ser una la suma ponderada de las entradas y los pesos sinápticos. La salida de función de ponderación llega a la función de activación que transforma este valor en otro en el dominio que trabajen las salidas de las neuronas. La salida de la función de red es evaluada en la función de activación que da lugar a la salida de la señal de esta neurona a otra vecina.

5.2 *Características de las RNA´s*

Las características o propiedades que hacen a las redes atractivas son su capacidad de:

- Aprender, adquiriendo el conocimiento de una cosa por medio de la experiencia, ajustándose en base a un conjunto de entradas para producir unas salidas consistentes.

- Generalizar ya que pueden ofrecer, dentro de un margen, respuestas correctas a entradas que presentan pequeñas variaciones debido a los efectos de ruido o distorsión.

- Auto-organizar la información que reciben durante el aprendizaje y/o la operación pudiendo dar respuesta a una situación nunca antes expuesta, o solucionar problemas en los cuales la información de entrada no es muy clara está incompleta.

- Abstraer, la esencia de un conjunto de entradas que aparentemente no presentan aspectos comunes o relativos, tolerando así fallos de los datos.

- Operar en tiempo real

- Simular sistemas no lineales y caóticos, que con los métodos clásicos lineales es imposible realizar.

- Establecer relaciones no lineales entre datos.

- Ser fácilmente implantados dentro de otra tecnología y hardware.

5.3 *Arquitecturas de una RNA*

Existen varios tipos de redes neuronales artificiales dependiendo de la complejidad del problema a resolver, así como de los datos existentes para ello. El perceptrón es el tipo de red neuronal más sencillo que se puede implementar. Este tipo de red sólo sirve para clasificar los elementos pertenecientes a dos clases linealmente separables. Cuando el problema es más complejo y se necesitan además de las capas de entrada y de salida, capas ocultas. Este tipo de redes, al componerse de varias capas, tiene la característica de no ser lineal, es decir, es capaz de clasificar entradas que pertenecen a dos o más clases que no son linealmente separables. En este estudio es el tipo de red que se ha utilizado por lo que se profundizará más en ella.

Pueden existir infinidad de configuraciones para un MLP jugando con el número de capas ocultas, número de neuronas en cada capa, número de salidas, entradas en cada neurona, e incluso con el número de entradas a la red, este último dependiendo de la aplicación. Hay que considerar, que existen diferentes arquitecturas de redes como solución, pero si probablemente un tamaño de arquitectura mínimo que nos facilita el trabajo en el diseño. Arquitecturas con el número de neuronas en la capa oculta, mejor será aproximación obtenida, aunque puede provocar inestabilidad en el sistema, aumentando el tiempo de entrenamiento y de predicción.

Para el entrenamiento/aprendizaje existen diferentes funciones de entrenamiento, supervisado, no supervisado, siendo la más común utilizado para este tipo de red MLP, el Back-Propagation Algorithm de entrenamiento supervisado con dos fases de propagación hacia adelante y otra fase de propagación hacia atrás. Esta red utiliza como mínimo tres capas, entrada, salida y oculta y se fundamenta de la siguiente forma.

A la red se le exponen diferentes datos de entrada que corresponden con otros datos de salida que serán la deseada. Cada neurona de la entrada se corresponde con un elemento del vector patrón de entrada con un valor, con el cual a través de la función de activación elegida se produce el valor de salida hacia la otra capa, propagándose hacia adelante hacia las demás capas.

Con la diferencia entre las salidas deseadas y las salidas actuales en la capa de salida de la red se procede a cambiar los pesos (iniciados con valores aleatorios pequeños) con el fin de reducir al mínimo esta diferencia (error). Esto se logra mediante una serie de iteraciones donde se modifica cada peso de derecha a izquierda (sentido inverso de la propagación de información en la red) hasta modificarse los pesos de la capa de entrada prosiguiendo nuevamente con la propagación de la información de entrada, esto hasta que la diferencia entre la salida deseada y la obtenida en cada neurona de salida sea mínima. En función de la dirección del movimiento de la información, se puede realizar una clasificación en:

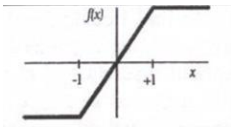
- Conexiones hacia delante (Feed Forward). Para todos los modelos neuronales, los datos de las neuronas de una capa inferior son propagados hacia las neuronas de la capa superior por medio de las redes de conexiones hacia adelante.

- Conexiones hacia atrás (Feed Back). Estas conexiones, llevan los datos de las neuronas de una capa superior a otras de la capa inferior.

Las funciones de activación calcula el estado de actividad de una neurona, transformando la entrada global en un valor de activación, cuyo rango normalmente va de (0 a 1) o de (–1 a 1). Las funciones de activación más comúnmente utilizadas son:

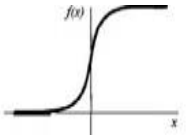
- Función lineal, cuyo rango de salida se encuentra entre [-1+1]

$$y = \begin{cases} -1, si\ x < -l \\ x, si + l \leq x \leq -l \\ +1, si\ x > +l \end{cases}$$



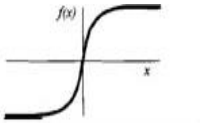
- Función sigmoidal logarítmica, Los valores de salida que proporciona esta función están comprendidos dentro de un rango que va de 0 a 1.

$$y = \frac{1}{1+e^{-x}};$$



- Función tangencial hiperbólica. Los valores de salida varían dentro de un rango que va de -1 a 1.

$$y = tgh(x)$$



5.4 *Desarrollo de modelos neuronales artificiales*

Conociendo la naturaleza del problema a resolver y los datos a emplear se elige el tipo de red (MPL), el algoritmo de entrenamiento (Backpropagation-Feedback). Tras realizar la distinción entre los datos a utilizar en los modelos de calibración y los utilizados para validación, se procede al diseño de la topología de la red, número de capas ocultas, número de neuronas por capa, función de activación o transferencia de información entre capas.

Para comprobar la eficacia de una red se recurre a la convergencia. En el proceso de entrenamiento o aprendizaje de la Backpropagation es frecuente medir cuantitativamente el aprendizaje mediante el valor RMS (Root Mean Square) del error de la red. Esta medida refleja el modo en el que la red está logrando respuestas correctas; a medida que la red aprende, su valor RMS decrece. Debido a que los valores de salida de la red y los valores de salidas deseadas son valores reales, es necesario definir un parámetro de corte o un valor umbral del valor RMS del error de la red que permita decir que la red se aproxima a la salida deseada y considerar que la respuesta es correcta. La convergencia es un proceso en el que el valor RMS del error de la red tiende cada vez más al valor 0.

Una vez terminado el proceso de entrenamiento, con el conjunto de datos de validación reservados se valida la red. La evaluación viene dada por el error, de forma que para N iteraciones se calcula el error cuadrático de predicción (RMSEP) y el coeficiente de regresión (r). Los modelos creados deben someterse a una validación externa con datos no utilizados anteriormente y comprobar sus predicciones, su correcto funcionamiento y realizar si fuera necesario nuevas calibraciones. A través de los datos estadísticos RMSEP, r y junto con los otros valores RPD (Residual Predictive Deviation) y RER (Relative Error Range) nos indicará si la red creada funciona correctamente para análisis cuantitativos, en este caso y la calidad de sus predicciones según (Williams and Sobering, 1993, 1996).

$$RPD = \frac{SD}{RMSEP} \qquad RER = \frac{Range\ Validation}{RMSEP}$$

siendo SD la desviación estándar de los datos de referencia empleados en la predicción.

Valores RPD superiores a 3 indican una excelente predicción para propósitos analíticos, para análisis cuantitativos valores de 2.5-3 y para análisis cualitativos 2.5–2. Una red tiene una buena calibración para ser usada en control de calidad de productos alimentarios cuando el valor de RER es superior a 10 (Williams and Sobering, 1993).

Para determinar la exactitud, se realiza una comparación de los valores medios obtenidos por ambos procedimientos mediante una comparación de medias,

calculándose la desviación estándar del sistema o varianza conjunta Se emplea el test t_e-Student para comparación de medias, calculándose la desviación estándar del sistema o varianza conjunta. Sí se cumple que $t_{exp}<t_{teor}$ (α=0.05 de nivel de significancia), se puede decir que no hay diferencias significativas estadísticamente entre las medias obtenidas por ambos métodos.

5.5 *Aplicación de los modelos neuronales*

Las redes han dejado de ser un tema de interés académico, para pasar a ser una sólida tecnología de aplicaciones a diversas áreas gracias a su buen comportamiento. Se han convertido en una herramienta eficaz para el modelado de los procesos de control de producción, tanto partiendo de datos de la propia producción como de datos simulados o procedentes de diseños de experimentos. Una de las características de muchos procesos industriales es el complejo de interrelaciones entre las variables del proceso. Esto unido a la falta de sensores reales, ha llevado al desarrollo de las redes actúan como sensores virtuales (sensores "software"), donde, por medio de un programa de ordenador, las variables se estiman a partir de la información recogida por otras mediciones y demostrando ser herramientas poderosas para la determinación de variables de estado que no se pueden medir directamente.

La lista de aplicaciones actuales de esta tecnología incluye:

- Simulación y control de procesos químicos
- Predicción de diversos parámetros ya sean offline u online.
- Control de calidad
- Identificación de polímeros y compuestos químicos
- Monitorización de parámetros de control de procesos
- Análisis de mercado (stocks,costos,precios)

- Modelización para programas de entrenamiento de operadores
- Mantenimiento preventivo: localización incipiente de fallos.
- Entre otras.

La aplicación de los modelos neuronales basados en redes neuronales dentro del sector industrial alimenticio y en concreto en el sector del aceite de oliva, puede ser muy diversa.

Desde modelos que pueden usarse como sensores virtuales que analizan en tiempo real los parámetros que regulan la calidad de las muestras seleccionadas.

Pasando por predicciones con antelación de las características de los productos finales con el fin de introducir dichos modelos en un software de control y control de los equipos, modelando cada fase del proceso y optimizando así los recursos, a la vez que se consigue la máxima calidad del producto que pueda ofrecer la materia prima utilizada.

Referencias

Aguilera, M.P., Jimenez, A., Sanchez-Villasclaras, S., Uceda, M., Beltran, G., 2015. Modulation of bitterness and pungency in virgin olive oil from unripe «Picual» fruits. *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **117**, 1463–1472. doi:10.1002/ejlt.201400432

Aguilera, M.P., Jiménez, A., Beltrán, G., 2010. Condiciones de batido de la pasta de aceiteuna en frutos Picual de recolección temprana. *Vida Rural* 32–35.

Alba, J., 2008. Elaboración del aceite de oliva virgen., in: Barranco D., F.-E.R. y R.L. (Ed.), El Cultivo Del Olivo. Mundi-Prensa, Madrid, pp. 657–698.

Allouche, Y., Funes López, E., Maza, G.B., Márquez, A.J., 2015. Near infrared spectroscopy and artificial neural network to characterise olive fruit and oil online for process optimisation. *J. Near Infrared Spectrosc.* **23**, 111–121. doi:10.1255/jnirs.1155

Angerosa, F., 2003. Calidad sensorial de los aceites de oliva, in: Aparicio, R., Hardwood, J. (Eds.), Handbook of Olive Oil Analysis and Properties. Ed. Mundi-Prensa, Madrid, pp. 345–380.

Armenta, S., Garrigues, S., de la Guardia, M., 2007. Determination of edible oil parameters by near infrared spectrometry. *Anal. Chim. Acta* **596**, 330–7. doi:10.1016/j.aca.2007.06.028

Aroca-Santos, R., Cancilla, J.C., Matute, G., Torrecilla, J.S., 2015. Identifying and Quantifying Adulterants in Extra Virgin Olive Oil of the Picual Varietal by Absorption Spectroscopy and Nonlinear Modeling. *J. Agric. Food Chem.* **63**, 5646–52. doi:10.1021/acs.jafc.5b01700

Baldioli, M., Servili, M., Perretti, G., Montedoro, G.F., 1996. Antioxidant activity of tocopherols and phenolic compounds of virgin olive oil. *J. Am. Oil Chem. Soc.* **73**, 1589–1593. doi:10.1007/BF02523530

Barnett, V., Lewis, T., 1994. Outliers in Stadtistical Data, Tercera. ed. Wiley and Sons.

Barranco, D., Fernandez-Escobar, R., Rallo, L., 2008. El Cultivo del Olivo (6ª Ed.), Mundi-Pren. ed. Madrid.

Basheer, I.., Hajmeer, M., 2000. Artificial neural networks: fundamentals, computing, design, and application. *J. Microbiol. Methods* **43**, 3–31. doi:10.1016/S0167-7012(00)00201-3

Beghi, R., Giovenzana, V., Civelli, R., Cini, E., Guidetti, R., 2013. Characterisation of olive fruit for the milling process by using visible/near infrared spectroscopy. *J. Agric. Eng.* **44**, 56. doi:http://dx.doi.org/10.4081/jae.2013.e8

Behroozi Khazaei, N., Tavakoli, T., Ghassemian, H., Khoshtaghaza, M.H., Banakar, A., 2013. Applied machine vision and artificial neural network for modeling and controlling of the grape drying process. *Comput. Electron. Agric.* **98**, 205–213. doi:10.1016/j.compag.2013.08.010

Bejaoui, M.A., Beltrán, G., Aguilera, M.P., Jiménez, A., 2016a. Continuous conditioning of olive paste by high power ultrasounds: Response surface methodology to predict temperature and its effect on oil yield and virgin olive oil characteristics. *LWT - Food Sci. Technol.* **69**, 175–184.

Bejaoui, M.A., Beltrán, G., Sanchez-Ortiz, A., Sanchez-Villasclaras, S., Jiménez, A., 2016b. Continuous high power ultrasound treatment before malaxation, a laboratory scale approach: Effect on virgin olive oil quality criteria and yield. *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **118**, 332–336.

Beltrán, G., Bejaoui, M.A., Sánchez-Ortiz, A., Jiménez, A., 2016. El agua de lavado un factor de riesgo en la calidad de los AOVE. *Olimerca* **16**, 32–37.

Beltrán, G., Aguilera, M.P., Funes, E., Jiménez, A., 2012. Eliminación automática de las borras en depósitos de almacenamiento. Efecto sobre la calidad del aceite. *Mercacei* **72**, 191.

Beltrán, G., Aguilera, M.P., Allouche, Y., Jiménez, A., 2010a. Efectos de la molienda del fruto sobre el rendimiento industrial del proceso y la calidad del aceite. *Vida Rural* 28–31.

Beltrán, G., Jiménez, A., Del-Rio, C., Sánchez, S., Martínez, L., Uceda, M., Aguilera, M.P., 2010b. Variability of vitamin E in virgin olive oil by agronomical and genetic factors. *J. Food Compos. Anal.* **23**, 633–639. doi:10.1016/j.jfca.2010.03.003

Beltrán, G., Jiménez, A., Aguilera, M.P., Uceda, M., 2000. Phenolic fraction analysis by HPLC of "Arbequina" virgin olive oils. Relationship with bitterness K225 and oil stability. *Grasas y Aceites* **51**, 320–324. doi:10.3989/gya.2000.v51.i5.432

Beltrán, G., Del Rio, C., Sánchez, S., Martínez, L., 2004. Influence of harvest date and crop yield on the fatty acid composition of virgin olive oils from cv. "Picual." *J. Agric. Food Chem.* **52**, 3434–3440. doi:10.1021/jf049894n

Beltrán G., Uceda M., Jiménez A., A.M., 2003. Olive oil extractability index as a parameter for olive cultivar characterization. *J. Sci. Food Agric.* **83**, 503–506.

Bendini, A., Cerretani, L., Di Virgilio, F., Belloni, P., Lercker, G., Toschi, T.G., 2007. In-process monitoring in industrial olive mill by means of FT-NIR. *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **109**, 498–504. doi:10.1002/ejlt.200700001

Bertrand, D., Dufour, E., 2000. La spectroscopie infrarouge et ses applications analytiques. Editions TEC & DOC, Paris.

Biswajit Sarkar, Sunando DasGupta, S. De, 2009. Application of external electric field to enhance the permeate flux during micellar enhanced ultrafiltration. *Sep. Purif. Technol.* **66**, 263–272.

Blanco, M., Alcalà., M., 2005. Use of near-infrared spectroscopy for off-line measurements in the pharmaceutical industry, in: Bakeev, K.A. (Ed.), Process Analytical Technology. Blackwell Publishing Ltd, Oxford. UK.

Blekas, G., Tsimidou, M., 2006. 4 – Olive Oil Composition, in: Olive Oil. pp. 41–72. doi:10.1016/B978-1-893997-88-2.50008-0

Bokobza, L., 2002. Chapter 1: Origin of Near-Infrared Absorption Bands, in: Siesler, H.., Ozaki, Y., Kawata, S., Heise, H.M. (Eds.), Near-Infrared Spectroscopy: Principles, Instruments, Applications. Wiley-VCH Verlag., Weinheim.

Boskou, D., 2015a. Olive and Olive Oil Bioactive Constituents, Olive and Olive Oil Bioactive Constituents. Elsevier. doi:10.1016/B978-1-63067-041-2.50007-0

Boskou, D., 2015b. Specialty Oils and Fats in Food and Nutrition, Specialty Oils and Fats in Food and Nutrition: Properties, Processing and Applications. Elsevier. doi:10.1016/B978-1-78242-376-8.00001-6

Boskou Dr., D., 2011. Vegetable Oils in Food Technology, Vegetable Oils in Food Technology: Composition, Properties and Uses, Second Edition. Wiley-Blackwell, Oxford, UK. doi:10.1002/9781444339925

Boskou, D., 2006. 2 – Characteristics of the Olive Tree and Olive Fruit, in: Olive Oil. pp. 13–19. doi:10.1016/B978-1-893997-88-2.50006-7

Brenes, M., García, A., García, P., Ríos, J., Garrido, A., 1999. Phenolic compounds in spanish olive oils. *J. Agric. Food Chem.* **47**, 3535.

Burón, I., García-Teresa, R., 1979. La calidad del aceite de oliva., in: Comunicaciones INIA.

Cárdenas, R., Marcos, J., 2013. Cap. 4.Proceso de extracción de aceite de oliva, in: Ibérica, G.W.S. (Ed.), El Manual Del Maestro de Almazara. Andújar (Jaén), pp. 88–143.

Casale, M., Simonetti, R., 2014. Review: Near infrared spectroscopy for analysing olive oils. *J. Near Infrared Spectrosc*. **22**, 59–80.

Casale, M., Zunin, P., Cosulich, M.E., Pistarino, E., Perego, P., Lanteri, S., 2010. Characterisation of table olive cultivar by NIR spectroscopy. *Food Chem.* **122**, 1261. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j. foodchem. 2010.03.080

Cayuela, J.A., Yousfi, K., Carmen Martínez, M., García, J.M., 2014. Rapid determination of olive oil chlorophylls and carotenoids by using visible

spectroscopy. *J. Am. Oil Chem. Soc.* **91**, 1677–1684. doi:10.1007/s11746-014-2515-1

Cayuela Sánchez, J.A., Moreda, W., García, J.M., 2013. Rapid determination of olive oil oxidative stability and its major quality parameters using vis/NIR transmittance spectroscopy. *J. Agric. Food Chem.* **61**, 8056–62. doi:10.1021/jf4021575

Cayuela Sánchez, J., 2012. Using near-infrared spectroscopy to predict postharvest quality. CAB *Rev. Perspect. Agric. Vet. Sci. Nutr. Nat. Resour.* **7**. doi:10.1079/PAVSNNR20127021

Cayuela, J.A., Pérez-Camino, M.C., 2010. Prediction of quality of intact olives by near infrared spectroscopy. *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **112**, 1209. doi:http://dx.doi.org/10.1002/ejlt.201000372

Cayuela, J.A., García, J.M., Caliani, N., 2009. NIR prediction of fruit moisture, free acidity and oil content in intact olives. *Grasas y Aceites* **60**, 194. doi:http://dx.doi.org/10.3989/gya.097308

Cert, A., Alba, J., Pérez-Camino, M.C., Ruíz-Gómez, A., Hidalgo, F., 1999. influencia de los sistemas de extracción sobre las características y los componenetes menores del aceite de oliva virgen extra. *Olivae* **79**, 41.

Chen, Y.S., Chen, A.O., 1995. Leaping ahead with Near Infrared Spectroscopy, in: Batten, G.D., Flinn, L.A., Wlesh, L.A., Blakeney, A.B. (Eds.), Leaping Ahead with Near Infrared Spectroscopy. Lorne, p. 316.

Cho, S.., Kin, J.Y., Rhee, C., 1998. *J. Near Infrared Spectrosc.* **6**, 349.

Ciurczack, E.W., 2008. Basic principles of Near-Infrared Spectroscopy, in: Ciurczack, D.A.B. y E.W. (Ed.), Handbook of Near Infrared Spectroscopy Analysis. Taylor and Francis Group.

Clodoveo, M.L., Dipalmo, T., Schiano, C., La Notte, D., Pati, S., 2014. What's now, what's new and what's next in virgin olive oil elaboration systems. A perspective on current knowledge and future trends. *J. Agric. Eng.* **45**, 49. doi:10.4081/jae.2014.193

Clodoveo, M.L., 2012. Malaxation: Influence on virgin olive oil quality. Past, present and future. An overview. *Trends Food Sci. Technol.* **25**, 13–23.

COI, 2015. T.15/NC No 3/Rev. 8.

Cueva, R.E., 2012. Aplicación de la espectroscopía NIR para la determinación de parámetros críticos en la fabricación de comprimidos en la inddustria farmacéutica.

Di Giovacchino, L., 2013. Technological Aspects, in: Aparicio, R., Harwood, J. (Eds.), Handbook of Olive Oil. Springer US, Boston, MA, pp. 57–96. doi:10.1007/978-1-4614-7777-8_3

Di-Giovacchino, L., Sestili, S., Di-Vincenzo, D., 2002. Influence of olive processing on virgin olive oil quality. *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **104**, 587–601.

Downey, G., McIntyre, P., Davies, A.N., 2002. Detecting and Quantifying Sunflower Oil Adulteration in Extra Virgin Olive Oils from the Eastern Mediterranean by Visible and Near-Infrared Spectroscopy. *J. Agric. Food Chem.* **50**, 5520–5525. doi:10.1021/jf0257188

Dufou, É., 2009. Chapter 1: Principles of Infrared Spectroscopy, in: Sun, D.-W. (Ed.), Infrared Spectroscopy for Food Quality Analysis and Control. Academic Press, Amsterdam.

Dupuy, N., Galtier, O., Le Dréau, Y., Pinatel, C., Kister, J., Artaud, J., 2010. Chemometric analysis of combined NIR and MIR spectra to characterize French olives. *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **112**, 463–475. doi:10.1002/ejlt.200900198

Endo, Y., Usuki, R., Kaneda, T., 1985. Antioxidant effects of chlorophyll and pheophytin on the autoxidation of oils in the dark. I. Comparison of the inhibitory effects. *J. Am. Oil Chem. Soc.* **62**, 1375–1378. doi:10.1007/BF02545962

Faria, S., Rodrigues, C.A., Nunes, R., dos Santos, R.M., 2015. Evaluation of extra virgin olive oil stability by artificial neural network. *Food Chem.* **179**, 35–43.

Fedeli, E., 1977. Lipids of olives. *Progr. Chem. Fats other Lipids.* **15**, 57.

Fedeli, E., Jacini, G., 1971. Lipids composition of vegetable oils. Adv. Lipids.

Fernández Pierna, J.A., Jin, L., Daszykowski, M., Wahl, F., Massart, D.L., 2003. A methodology to detect outliers/inliers in prediction with PLS. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **68**, 17–28. doi:10.1016/S0169-7439(03)00084-4

Fernández Pierna, J., Wahl, F., de Noord, O., Massart, D., 2002. Methods for outlier detection in prediction. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **63**, 27–39. doi:10.1016/S0169-7439(02)00034-5

Fregapane, G., Salvador, M.D., 2013. Production of superior quality extra virgin olive oil modulating the content and profile of its minor components. *Food Res. Int.* **54**, 1907–1914. doi:10.1016/j.foodres.2013.04.022

Funes, E., Allouche, Y., Beltrán, G., Jiménez, A., 2015. A Review: Artificial Neural Networks as Tool for Control Food Industry Process. *J. Sens. Technol.* **5**, 28–43. doi:10.4236/jst.2015.51004

Furferi, R., Governi, L., Volpe, Y., 2010. ANN-based method for olive Ripening Index automatic prediction. *J. Food Eng.* **101**, 318–328. doi:10.1016/j.jfoodeng.2010.07.016

Furferi, R., Carfagni, M., Daou, M., 2008. Real-time estimation of peroxides and acidity level of extra-virgin olive oil: an integrated approach. *Int. J. Math. Comput. Simul.* **2**.

Furferi, R., Carfagni, M., Daou, M., 2007. Artificial neural network software for real-time estimation of olive oil qualitative parameters during continuous extraction. *Comput. Electron. Agric.* **55**, 115–131. doi:10.1016/j.compag.2006.12.006

Gandul-Rojas, B., Gallardo-Guerrero, L., Roca, M., Aparicio, R., 2013. Chapter 7 Chromatographic Methodologies: Compounds for Olive Oil Color Issues, in: Handbook of Olive Oil Analysis and Properties. pp. 219–260.

Garcia, A., Léon, L., 2011. Non-destructive assessment of olive fruit ripening by portable near infrared spectroscopy. *Grasas y Aceites* **62**, 268. doi:http://dx.doi.org/10.3989/gya.089610

Garcia, J.A., Hermoso, M., Cáceres, P., 1996. Determination of oil and moisture in two-phases olive-pomace by using near-infreared spectroscopy. *Grasas y Aceites* **47**, 317–322.

García-González, D.L., Baeten, V., Fernández Pierna, J.A., Tena, N., 2013. Chapter 10 Infrared, Raman, and Fluorescence Spectroscopies: Methodologies and Applications, in: Aparicio, R., Harwood, J. (Eds.), Handbook of Olive Oil Analysis and Properties. Springer, New York, pp. 335–395. doi:10.1007/978-1-4614-7777-8

García-Sánchez, A., Ramos Martos, N., Ballesteros, E., 2005. Estudio comparativo de distintas técnicas analíticas (espectroscopía de NIR y extracción mediante Soxhlet) para la determinación del contenido graso y de humedad en aceitunas y orujo de Jaén. *Grasas y Aceites* **56**, 220–227.

Gila, A., Beltrán, G., Bejaoui, M.A., Sánchez, S., Nopens, I., Jiménez, A., 2016. Modeling the settling behavior in virgin olive oil from a horizontal screw solid bowl. *J. Food Eng.* **168**, 148–153. doi:10.1016/j.jfoodeng.2015.07.016

Gökmen, V., Açar, Ö.C., Serpen, A., Sügüt, I., 2009. Modeling dead-end ultrafiltration of apple juice using artificial neural network. *J. Food Process Eng.* **32**, 248–264.

Gómez, C., 2007. Matter transfer during virgin olive oil elaboration. *Grasas y Aceites* **58**, 194–205.

Gonçalves, E.C., Minim, L.A., Coimbra, J.S.R., Minim, V.P.R., 2005. Modeling sterilization process of canned foods using artificial neural networks. *Chem. Eng. Process.* **44**, 1269–1276.

Gorry, P.A., 1990. General least-squares smoothing and differentiation by the convolution (Savitzky-Golay) method. *Anal. Chim. Acta* **62**, 570–573.

Gutiérrez-Rosales, F., Perdiguero, S., Gutiérrez, R., Olías, J.M., 1992. Evaluation of the bitter taste in virgin olive oil. *J. Am. Oil Chem. Soc*. **62**, 394–395.

Hermoso, M., Delgado, J., Uceda, M., Garcia-Ortiz, A., Morales, J., Frías, L., Fernandez, A., 1998a. Elaboracion del aceite de oliva de calidad. Obtencion por el sistema de dos fases. Sevilla.

Hermoso, M., García-Ortíz, A., Jiménez, A., Uceda, M., Morales, J., 1998b. Automatización de almazaras. Controles experimentales para la caracterización y regulación del proceso de elaboración, in: INIA (CAO97-015).1997–2000.

Hermoso, M., Uceda, M., García, A., Jiménez, A., Beltrán, G., 1997. Preliminary results of NIR on-line for oil contentand humidity in olive cakes from the two-phases decanter. *Acta Hortic.* **474**, 717.

Higgins, A., Prestwidge, D., Stirling, D., Yost, J., 2010. Forecasting maturity of green peas: An application of neural networks. *Comput. Electron. Agric.* **70**, 151–156. doi:10.1016/j.compag.2009.09.018

Holman, R.T., Edmondson, V., 1956. Near infrared spectra of fatty acids and some related substances. *Anal. Bioanal. Chem*. **28**, 1533–1538.

Inarejos-García, A.M., Gómez-Alonso, S., Fregapane, G., Salvador, M.D., 2013. Evaluation of minor components, sensory characteristics and quality of virgin olive oil by near infrared (NIR) spectroscopy. *Food Res. Int.* **50**, 250–258. doi:10.1016/j.foodres.2012.10.029

Inarejos-García, A.M., Fregapane, G., Salvador, M.D., 2011. Effect of crushing on olive paste and virgin olive oil minor componenets. *Eur. Food Res. Technol.* **232**, 441–451.

Inarejos-García, A.M., Gómez-Rico, A., Salvador, M.D., Fregapane, G., 2009. Influence of malaxation conditions on virgin oil yield, overall quality and composition. *Eur. Food Res. Technol.* **228**, 671–677.

ISO 662:2016, 2016. Animal and vegetable fats and oils. Determination of moisture and volatile matter content.

ISO 9936:2016, 2016. Animal and vegetable fats and oils. Determination of tocopherols

ISO 663:2007, 2007. Animal and vegetable fats and oils. Determination of insoluble impurities content.

and tocotrienols contents by High-performance liquid chromatography.

IUPAC, 1992. Determination of tocopherols and tocotrienols in vegetable fats by HPLC. Method 2432. In: Standard Methods of Analyses of Oils Fats and Derivatives. Blackwell, Oxford, UK.

Jiménez, A., Gila, A., Bejaoui, M.A., Aguilera, M.P., Sánchez, A., Beltrán, G., 2014. La reducción de agua en la centrifugación vertical mejora la calidad del AOVE. *Olimerca*.

Jiménez Marquez, A., Aguilera Herrera, M.P., Uceda Ojeda, M., Beltrán Maza, G., 2009. Neural network as tool for virgin olive oil elaboration process optimization. *J. Food Eng.* **95**, 135–141. doi:10.1016/j.jfoodeng.2009.04.021

Jiménez, A., Beltrán, G., Aguilera, M.P., Uceda, M., 2008. A sensor-software based on artificial neural network for the optimization of olive oil elaboration process. *Sensors Actuators, B Chem.* **129**, 985–990. doi:10.1016/j.snb.2007.09.030

Jiménez, A., Molina, A., Pascual, M.I., 2005. Using optical NIR sensor for on-line virgin olive oils characterization. *Sensors Actuators, B Chem.* **107**, 64–68. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.snb.2004.11.103

Jiménez, A., 2003. Thesis Doc. Contribuciones al empleo de la espectroscopía en el infrarrojo cercano en el control de calidad del aceite de olia virgen. Aplicación al análisis en línea en almazara.

Jiménez Marquez, A., 2003. Monitoring carotenoid and chlorophyll pigments in virgin olive oil by visible-near infrared transmitance spectroscopy. On-line application. *J. Near Infrared Spectrosc.* **11**, 219–226.

Jiménez, A., Izquierdo, E., Rodríguez, F., Dueñas, J.I., Tortosa, C., 2000. Determinación de grasa y humedad en aceitunasmediante medidas de reflectancia en infrarrojocercano. *Grasas y Aceites* **51**, 311.

Jiménez, A., Hermoso, M., Uceda, M., 1995. Elaboración del aceite de oliva virgen mediante sistema continúo de dos fases. Influencia de diferentes variables del proceso en algunos parámetros relacionados con la calidad del aceite. *Grasas y Aceites* **46**, 299–303.

Jiménez-Jiménez, F., Castro-García, S., Blanco-Roldán, G., González-Sánchez, E.J., Gil-Ribes, J.A., 2013. Isolation of table olive damage causes and bruise time evolution during fruit detachment with trunk shaker. *Spanish J. Agric. Res.* **11**, 65. doi:http://dx.doi. org/10.5424/sjar/2013111-3399

Kasemsumran, S., Kang, N., Christy, A., Ozaki, Y., 2005. Partial least squares processing of NIR spectra for discriminationand quantification of adulterated olive oils. *Spectrosc. Lett. An Int. J. Rapid Commun.* **38**, 839. doi:http://dx.doi.org/ 10.1080/00387010500316189

Kawata, S., 2002. Chapter 4: New techniques in near-infrared spectroscopy, in: W Siesler, Y. Ozaki, S. Kawata, H.M.H. (Ed.), Near Infrared Spectroscopy: Principles, Instruments, Applications. Weinheim: Wiley-VCH, Verlag, pp. 75–83.

Koidis, A., Boskou, D., 2015. Processing and Impact on Active Components in Food, Processing and Impact on Active Components in Food. Elsevier. doi:10.1016/B978-0-12-404699-3.00032-9

Lash, P., 2012. Spectral pre-processing for biomedical vibrational spectroscopy and microspectroscopic imaging. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **117**, 100. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.chemolab.2012.03.011

León-Camacho, M., Morales, M.T., Aparicio, R., 2013. Capther 6 Compounds for Olive Oil Traceability Issues, in: Handbook of Olive Oil Analysis and Properties. pp. 163–219.

M. Tsimidou., 1998. Polyphenols and quality of virgin olive oil in retrospect. *Ital. J. Food Sci.* **10**, 99–116.

Mailer, R.J., 2004. Rapid evaluation of olive oil quality by NIR reflectance spectroscopy. *J. Am. Oil Chem. Soc.* **81**, 823–827. doi:http://dx.doi.org/10.1007/s11746-004-0986-4

Manley, M., Eberle, K., 2006. Comparison of Fourier transform near infrared spectroscopy partial least square regression models for South African extra virgin olive oil using spectra collected on two spectrophotometers at different resolutions and path lengths. *J. Near Infrared Spectrosc.* **14**, 111. doi:http://dx.doi.org/10.1255/ jnirs.597

Marini, F., Magrí, A.L., Bucci, R., Magrí, A.D., 2007. Use of different artificial neural networks to resolve binary blends of monocultivar Italian olive oils. *Anal. Chim. Acta* **599**, 232–240.

Martens, H., Naes, T., 1989. Multivariate calibration, 1ª ed. Chichester, England.

Masella, P., Parenti, A., Spugnoli, P., Calamai, L., 2012. Vertical centrifugation of virgin olive oil under inert gas. *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **114**, 1094–1096. doi:10.1002/ejlt.201100400

Masella, P., Parenti, A., Spugnoli, P., Calamai, L., 2010a. Nitrogen stripping to remove dissolved oxygen from extra virgin olive oil. *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **112**, 1389–1392.

Masella, P., Parenti, A., Spugnoli, P., Calamai, L., 2009. Influence of vertical centrifugation on extra virgin olive oil quality. *J. Am. Oil Chem. Soc.* **86**, 1137. doi:10.1007/s11746-009-1445-9

Mínguez-Mosquera, M.I., Gandul-Rojas, B., Montaño-Asquerino, A. Garrido-Fernández, J., 1991a. Determination of chlorophylls and carotenoids by high-performance liquid chromatography during olive lactic fermentation. *J. Chromatogr*. **585**, 259–266.

Minguez-Mosquera, M.I., Rejano-Navarro, L., Gandul-Rojas, B., Sánchez, A. and G.J., 1991b. Color-pigment correlation in virgin olive oil. *J. Am. Oil Chem. Soc.* **68**, 332–336.

Molto-Garcia, E., Blasco-Piquer, M., Aparicio-López, R., 2003. Desarrollo de sensores para la evaluación de la calidad del aceite de oliva. Agrícola vergel Frutic. *Hortic. Floric.* **253**, 32.

Monfort, C., 2014. Validación y transferencia de métodos analíticos mediante espectroscopia NIR.

Morales, M.T., Przybylski, R., 2013. Chapter 13 Olive Oil Oxidation, in: Handbook of Olive Oil Analysis and Properties. pp. 479–522.

Moreda, W., Pérez-Camino, M.C., Cert, A., 1995. Determinación de algunos parámetros de pureza en aceites de oliva. Resultados de un estudio colaborativo.-. *Grasas y Aceites* 46, 279–284.

Movagharnejad, K., Nikzad, M., 2007. Modeling of tomato drying using artificial neural network. *Comput. Electron. Agric.* **59**, 78–85.

Muik, B., Lendl, B., Molina-Díaz, A., Pérez-Villarejo, L., Ayora-Cañada, M.J., 2004. Determination of oil and water content in olive pomace using near infrared and Raman spectrometry. A comparative study. *Anal. Bioanal. Chem.* **379**, 35–41.

Nakano, K., Kurata, K., Kaneko, M., 1991. Effects of alcohol treatment on banana ripening and application of image processing to colour grade measuring. *J. Soc. Agric. Struct*. **21**, 03–208.

Official Journal European Union, 2014. Commission Implementing Regulation (EU) No. 1348/2013 amending Regulation (ECC) No 2568/91 on the characteristics of olive oil and olive-residue oil and on the relevant methods of analysis.

Oliveri, P., Casolino, M.C., Casale, M., Medini, L., Mare, F., Lanteri, S., 2013. A spectral transfer procedure for application of a single class-model to spectra recorded by different near-infrared spectrometers for authentication of olives in brine. *Anal. Chim. Acta* **761**, 46. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.aca.2012.11.020

Ozaki, Y., Morita, S., Du, Y., 2007. Spectral Analysis, in: Ozaki, Y., McClure, W.F., Christy, A.A. (Eds.), Near-Infrared Spectroscopy in Food Science and Technology. Wiley-Interescience.

Öztürk, B., Yalçin, A., Özdemir, D., 2010. Determination of olive oil adulteration with vegetable oils by near infrared spectroscopy coupled with multivariate calibration. *J. Near Infrared Spectrosc.* **18**, 191. doi:10.1255/jnirs.879

Peirs, A., Tirry, J., Verlinden, B., Darius, P., Nicolar, B.M., 2003. Effect of biological variability on the robustness of NIR models for soluble solids content of apples. *Postharvest Biol. Technol.* **28**, 269–280.

Peirs, A., Lammertyn, J., Ooms, K., Nicolaı¨, B.M., 2001. Prediction of the optimal picking date of different apple cultivars by means of VIS/NIR spectroscopy. *Postharvest Biol. Technol.* **21**, 189–199.

Peres, A.M., Baptista, P., Malheiro, R., Dias, L.G., Bento, A., Pereira, J.A., 2011. Chemometric classification of several olive cultivars from Trás-os-Montes region (northeast of Portugal) using artificial neural networks. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **105**, 65–73. doi:10.1016/j.chemolab.2010.11.001

Pérez-Camino, M.C., Dobarganes, M.C., 1994. Contribution to the study of gliceridic compounds in olive fruits during its maturation. *Acta Hortic.* **356**, 375–378.

Ram, T., Wiesman, Z., Parmet, I., Edan, Y., 2010. Olive oil content prediction models based on image processing. *Biosyst. Eng.* **105**, 221–232. doi:10.1016/j.biosystemseng.2009.10.011

Reglamento (UE) n^{o} 432, 2012.

Reglamento (CE) n^{o}1924, 2006.

Salguero-Chaparro, L., Peña-Rodríguez, F., 2014. On-line versus off-line NIRS analysis of intact olives. *LWT - Food Sci. Technol.* **56**, 363–369. doi:10.1016/j.lwt.2013.11.032

Salguero-Chaparro, L., Baeten, V., Fernández-Pierna, J.A., Peña-Rodríguez, F., 2013. Near infrared spectroscopy (NIRS) for on-line determination of quality parameters in intact olives. *Food Chem.* **139**, 1121–6. doi:10.1016/j.foodchem.2013.01.002

Sánchez-Ortiz, A., Pérez, A.G., Sanz, C., 2013. Synthesis of aroma compounds of virgin olive oil: Significance of the cleavage of polyunsaturated fatty acid hydroperoxides during the oil extraction process. *Food Res. Int.* **54**, 1972–1978. doi:10.1016/j.foodres.2013.03.045

Satish, S., Pydi Setty, Y.P., 2005. Modeling of a continuous fluidized bed dryer using artificial neural networks. Int. Commun. *Heat Mass Transf. J.* **32**, 539–547.

Sato, T., Kawano, S., Iwamoto, M., 1991. Near-infrared spectral patterns of fatty acid analysis from fats and oils. *J. Am. Oil Chem. Soc.* **68**, 827–833.

Savitsky A, G.M., 1964. Smoothing and differentiation of data by simplified least square procedures. *Anal. Bioanal. Chem.* **36**.

Servili, M., Montedoro., G., 2002. Contribution of phenolic compounds to virgin olive oil quality. *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **104**, 602–613.

Snee, R.D., 1977. Validation of regression models: method and examples. *Technometrics* **19**, 415–428.

Stella, E., Moscetti, R., Haff, R.P., Monarca, D., Cecchini, M., Contini, M., Massantini, R., 2015. Review: Recent advances in the use of non-destructive near infrared spectroscopy for intact olive fruits. *J. Near Infrared Spectrosc.* **23**, 197–208. doi:10.1255/jnirs.1169

Takamura, H., Hyakumoto, N., Endo, N., Matoba, T., 1995. *J. Near Infrared Spectrosc.* **3**, 219.

Tanajura da Silva, C.E., Filardi, V.L., Pepe, I.M., Chaves, M.A., Santos, C.M.S., 2015. Classification of food vegetable oils by fluorimetry and artificial neural networks. *Food Control* **47**, 86–91. doi:10.1016/j.foodcont.2014.06.030

Torrecilla, J.S., Vidal, S., Aroca-Santos, R., Wang, S.C., Cancilla, J.C., 2015. Spectroscopic determination of the photodegradation of monovarietal extra virgin olive oils and their binary mixtures through intelligent systems. *Talanta* **144**, 363–8. doi:10.1016/j.talanta.2015.06.042

Torrecilla, J.S., Cancilla, J.C., Matute, G., Díaz-Rodríguez, P., 2013. Neural network models to classify olive oils within the protected denomination of origin framework. *Int. J. Food Sci. Technol.* **48**, 2258–2534.

Torrecilla, J.S., Mena, M.L., Yáñez-Sedeño, P., García, J., 2008. Field determination of phenolic compounds in olive oil mill wastewater by artificial neural network. *Biochem. Eng. J.* **38**, 171–179. doi:10.1016/j.bej.2007.06.013

Torrecilla, J.S., Mena, M.L., Yáñez-Sedeño, P., García, J., 2007. Application of artificial neural network to the determination of phenolic compounds in olive oil mill wastewater. *J. Food Eng.* **81**, 544–552. doi:10.1016/j.jfoodeng.2006.12.003

Tsimidou, M., Blekas, G., 2006. 5 – Polar Phenolic Compounds, in: Olive Oil. pp. 73–92. doi:10.1016/B978-1-893997-88-2.50009-2

Tsimidou, M.Z., 2006. 6 – Olive Oil Quality, in: Olive Oil. pp. 93–111. doi:10.1016/B978-1-893997-88-2.50010-9

Uceda, M., Hermoso, M., Aguilera, M.P., 2008. La calidad del aceite de oliva, in: Barranco, D., Fernández-Escobar, R., Rallo, L. (Eds.), El Cultivo Del Olivo. Madrid, pp. 701–726.

Uceda, M., Jiménez, A., Beltrán, G., 2006. Olive oil extraction and quality. *Grasas y Aceites* **57**, 25. doi:http://dx.doi.org/10.3989/gya.2006.v57.i1.19

Uceda, M., Lovera, C., Alba, J., 2001. "Influencia de los procesos de elaboración en la calidad del aceite de oliva. Situación actual y perspectivas," in: Foro de La Industria Oleícola.

Uncu, O., Ozen, B., 2015. Prediction of various chemical parameters of olive oils with Fourier transform infrared spectroscopy. *LWT - Food Sci. Technol.* **63**, 978–984. doi:10.1016/j.lwt.2015.05.002

Vázquez-Roncero A., Janer del Valle C., Janer del Valle M.L., 1973. Determinación de los polifenoles totales del aceite de oliva. *Grasas y Aceites* **24**, 350.

Williams, P.C., 2008. Near-Infrared Technology—Getting the Best Out of Light. a Short Course in the Practical Implementation of Near-Infrared Spectroscopy for the User, Edn. 5.3. ed. Nanaimo, Canada.

Williams, P.C., Sobering, D.C., 1996. How do we do it: a brief summary of the methods we use in developing near infrared calibrations., in: Davies, A.M.C., Williams, P.C. (Eds.), Near Infrared Spectroscopy: The Future Waves. NIR Publications, Chichester, UK, pp. 185–188.

Williams, P.C., Sobering, D.C., 1993. Comparison of commercial Near-Infrared Transmittance and Reflectance instruments for analysis of whole grains and seeds. *J. Near Infrared Spectrosc.* **1**, 25–32.

Wu, D., He, Y., Nie, P.C., Cao, F., Y.D., B., 2010. Hybrid variable selection in visible and near-infrared spectral analysis for non-invasive quality determination of grape juice. *Anal. Chim. Acta* **659**, 229–237.

Yang, H., Irudayaraj, J., 2001. Comparison of near-infrared, fourier transform-infrared, and fourier transform-raman methods for determining olive pomace oil adulteration in extra virgin olive oil. *J. Am. Oil Chem. Soc.* **78**, 889–895. doi:10.1007/s11746-001-0360-6

Zeatier, M., Rutledge, D., 2009. Preprocessing Methods. Comprehensive Chemometrics. Elsevier, Oxford, UK.

Zell, A., Mamier, G., Vogt, M., Mache, N., 1995. User manual neural network simulator, version 4. ed. University of Stuttgart, Stuttgart.

Zonta, F., Stancher, B., 1987. Carotenoids content an d quality of olive oils. Riv. Ital. delle Sostanze Grasse LXIV, 53.

Zupan, J., Novic, M., Xinzhi, L., Gasteiger, J., 1994. Classification of multicomponent analytical data of olive oils using different neural networks. *Anal. Chim. Acta* **292**, 219–234.

Capítulo 2. Objetivos

Actualmente las almazaras realizan la optimación del proceso de extracción del aceite de oliva virgen mediante un control manual de las variables que lo regulan cuyo resultado es un proceso poco regulado y ajustado a las características del fruto lo que implica pérdidas significativas de aceite en los subproductos y un escaso control de calidad del producto final. Esto es debido a que dicho control manual es producto de una simple monitorización de las principales variables del proceso a partir de la recogida de información de algunos sensores implantados (temperatura, caudalímetros).

Cada vez son más las exigencias del mercado de productos de máxima calidad, respetuosos en producción y fabricación, con el medio ambiente y con la máxima calidad/precio. Esto hace que el proceso productivo deba ser controlado de forma más eficiente para conseguir una mayor productividad y mejor calidad del producto, disminuyendo las pérdidas en subproductos, mejorando el rendimiento de equipos, consiguiendo una disminución de tiempos muertos durante la producción, una disminución de consumo de energía, una mejora en la seguridad de las instalaciones, una producción más flexible y ajustable a las exigencias del consumidor y, en definitiva, un mejor control sobre la calidad de los aceites obtenidos.

Para ello es necesario el conocimiento en tiempo real de las características de los aceites elaborados para poder actuar, sobre las variables del proceso que inciden directamente sobre ella y conocer en el instante de su producción, las diferentes calidades obtenidas a fin de realizar un procesado y/o almacenamiento racional basado en las características diferenciales de los aceites.

Para que la regulación sea efectiva se debe conocer ‘on-line’ las características del fruto, del nivel de agotamiento de los subproductos y las características del aceite que se obtiene, ya que la naturaleza del fruto es cambiante y es necesario hacer un ajuste contuniado de las condiciones de trabajo. La dificultad radica en el gran número de variables que influyen en el proceso y la relación multifactorial entre ellas que influye en su regulación. Los sistemas de control implantados en la actualidad en las almazaras se dedican básicamente a la monitorización de las variables más importantes, sirviendo de ayuda al operario, pero dejando en sus manos la toma de decisiones. La cantidad de información que tiene que procesar en base a su experiencia y a los datos analíticos y de

producción a posteriori de la información analítica, dificulta la toma de decisiones para garantizar en cada momento que todo el proceso esté dentro de los objetivos marcados.

Sería útil para éste proceso el disponer de un instrumento que permitiese al operador prever con antelación el comportamiento del mismo y encontrar la combinación adecuada de las diferentes variables operativas, de acuerdo con las características de la aceituna que se está procesando, de manera que permitiera mejorara la eficacia de las diferentes etapas y, por tanto, mejorar el proceso productivo al permitir regular con antelación las condiciones necesarias para la preparación de la pasta de aceituna y la extracción del aceite.

En éste sentido y en los últimos años, se ha producido un incremento en el interés por nuevas tecnologías empleadas en otros procesos para adaptarlas a éste, como son la tecnología NIR y la inteligencia artificial mediante redes neuronales artificiales, reunidas en una sola herramienta, que permita reducir costes, y facilitar el manejo, mantenimiento, etc.,

Por su parte, las características de las redes neuronales artificiales les permiten ser empleadas para el modelado del proceso, obteniéndose modelos que imitan el comportamiento de una planta real y proporcionando una herramienta predictiva para optimizar, de manera inmediata, las variables del proceso en base a la monitorización en tiempo real de las características del fruto entrante y de los objetivos marcados (aceite y orujo). A partir de la información proporcionada por las mediciones en tiempo real y de las predicciones obtenidas con los modelos neuronales, es posible definir sistemas de control retroalimentando (Figura 1), capaces de interactuar con la planta real, optimizando el funcionamiento global del proceso de elaboración.

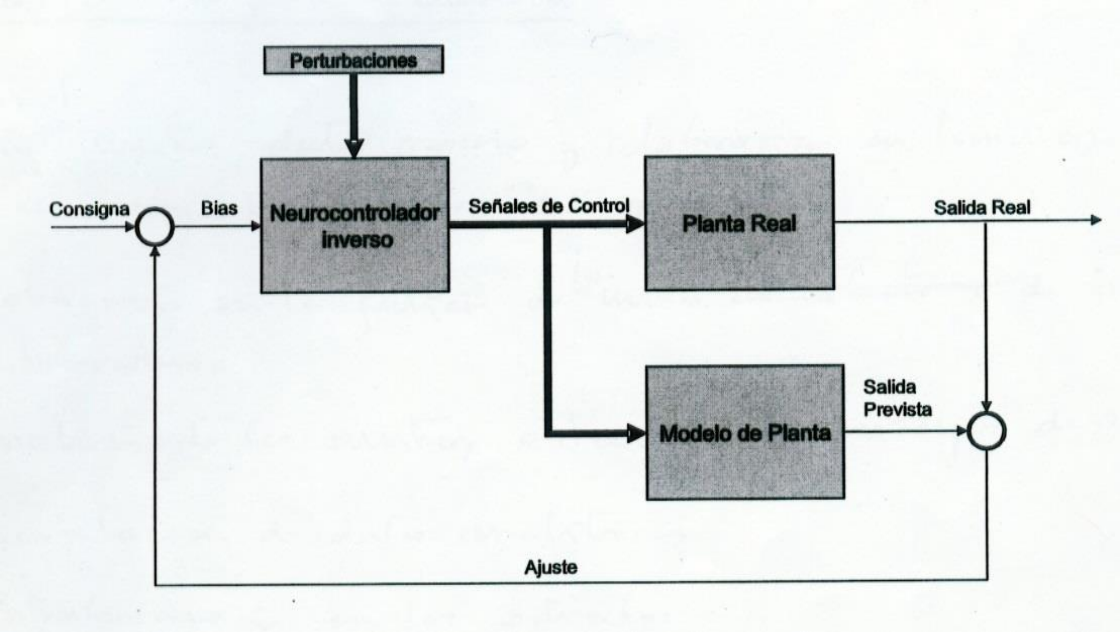


Figura 1. Neurocontrolador inverso de control de planta (Fuente. Memoria técnica del proyecto de modelado y optimización del proceso de elaboración de aceite de oliva virgen. Integración de sensores 'on-line' y técnicas de redes neuronales para la optimización del proceso. Proyecto de excelencia P10-AGR-6429).

En base a esto, el objetivo principal de este trabajo consiste en analizar la viabilidad de la tecnología NIR y de las redes neuronales artificiales como herramientas de ayuda a la optimización del funcionamiento del proceso de elaboración del aceite de oliva virgen y sus capacidades para integrarse en sistemas predictivos cuantitativos a partir de información en tiempo real de las diferentes variables que influyen en el proceso.

Para ello este objetivo principal se puede dividir en objetivos parciales detallados a continuación:

- Obtención de modelos neuronales predictivos de las características potenciales del fruto y del aceite de la aceituna antes de su procesado para establecer objetivos de control.
- Obtención de modelos neuronales predictivos que simulen el comportamiento del proceso de elaboración del aceite de oliva virgen a partir de la información espectral NIR e información de las variables del proceso y que permitan predecir las características de los productos de salida. En este objetivo se plantean varias estrategias:

  - Un modelado neuronal englobando todas las etapas del proceso.
  - Diferentes modelos que caracterizen a las principales etapas: preparación de la pasta, centrifugación y clarificación.

- Obtención de modelos neuronales de calibración para cuantificar propiedades de los productos finales del proceso, a partir de la información en tiempo real de los sensores NIR, y que permita comparar los valores reales que salen de la planta real con las previstas, de forma que, en un proceso de 'feedback', se pueda realizar un ajuste óptimo de las variables del proceso.

Capítulo 3. Resultados

Este capítulo es el núcleo central de la presente memoria de Tesis Doctoral y en él se muestran como resultados los trabajos experimentales que se han realizado para alcanzar los objetivos establecidos. Por tanto dicho capítulo consta de cuatro partes que se corresponden con los siguientes estudios que a continuación se presentan:

3.1. Una revisión: Redes neuronales artificiales como herramienta de control de procesos en industrias alimentarias

3.2. Predicción de las características potenciales de la masa de aceituna

3.3. Un modelo RNA predictivo como simulador del proceso AOVE

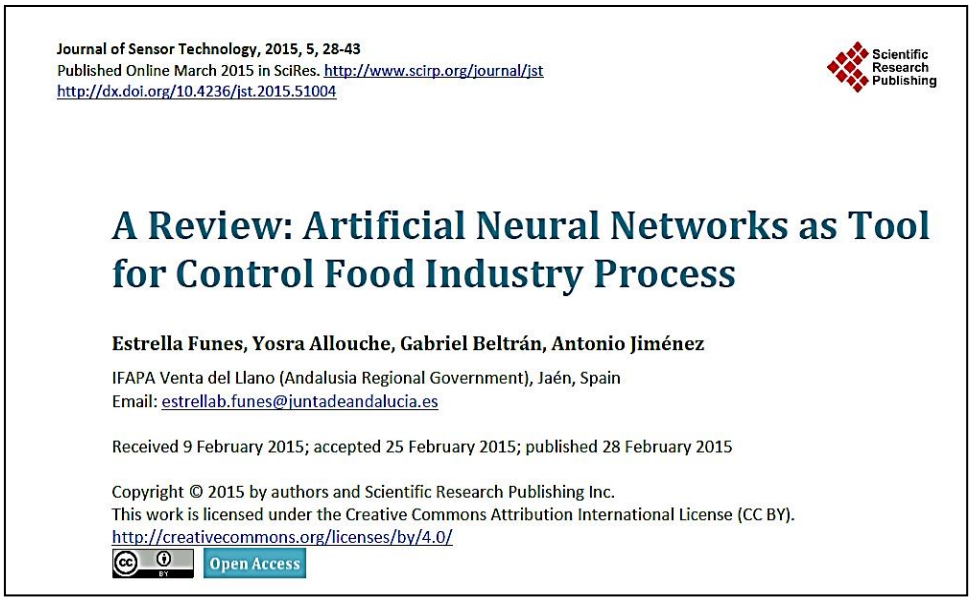
3.4. Modelado de las primeras fases del proceso de extracción de aceite de oliva virgen usando la inteligencia artificial

3.5. Modelos RNA´s predictivos para la optimización de la clarificación del aceite de oliva virgen extra mediante centrifuga vertical

3.6. Redes neuronales para la cuantificación en tiempo real en la almazara

Capítulo 3.1. Resultados.

Una revisión: Redes neuronales artificiales como herramienta de control de procesos en industrias alimentarias



Journal of Sensor Technology, 2015, 5, 28-43
Published Online March 2015 in SciRes. http://www.scirp.org/journal/jst
http://dx.doi.org/10.4236/jst.2015.51004

Scientific Research Publishing

A Review: Artificial Neural Networks as Tool for Control Food Industry Process

Estrella Funes, Yosra Allouche, Gabriel Beltrán, Antonio Jiménez

IFAPA Venta del Llano (Andalusia Regional Government), Jaén, Spain
Email: estrellab.funes@juntadeandalucia.es

Received 9 February 2015; accepted 25 February 2015; published 28 February 2015

Copyright © 2015 by authors and Scientific Research Publishing Inc.
This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).
http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/
Open Access

Abstract

En el último año, el interés en el uso de redes neuronales artificiales como una herramienta de modelado en la tecnología de alimentos está aumentando debido a la extensa utilización que se ha encontrado en la solución de numerosos y complejos problemas del mundo real. Debido a esto, y como paso previo al desarrollo de este proyecto, este documento pretende introducir al lector dentro de las redes neuronales: características generales de las RNA´s, arquitecturas, reglas de aprendizaje, tipos de redes y proceso de creación. También se presenta una revisión exhaustiva de las aplicaciones en la industria alimentaria de redes neuronales artificiales en el último año. Las aplicaciones industriales de las RNA´s se agrupan y están tabuladas por sus funciones principales desarrolladas en los documentos referenciados con excepción de las aplicaciones dentro del sector del aceite de oliva que son descritas con especial énfasis.

Keywords: Redes neuronales artificiales, aceite de oliva, el sensor en línea, control de procesos

Abbreviations: **MLP**: Multilayer Perceptron; **BP**: Backpropagation; **MLPFF**: Multilayer Feedforward; **RBF**: Radian Backpropagation; **SOM**: Self-Organizing-Map; **RNN**: Radian neural network; **P**: Perceptron

1. Introducción

En las últimas décadas, importantes investigaciones en el área de la inteligencia artificial han sido desarrolladas. Uno de los principales objetivos de la ciencia es la implementación de nuevas tecnologías con capacidad de cercanas al ser humano, e incluso puedan mejorarlas. La inteligencia artificial es un logro de gran alcance en diversos ámbitos, ya que puede complementar al ser humano en diversas actividades, tanto fáciles de realizar, como complejas e incluso imposible de realizar tal como se está llevando a cabo, sin interrupción durante largos periodos de tiempo y donde el conocimiento es necesario.

En la búsqueda de la naturaleza de los mecanismos inteligentes para intentar desarrollar máquinas que realizan tareas complejas, el cerebro humano es la principal fuente de inspiración, por eso es importante observar ciertas características que han sido cruciales del desarrollo de redes neuronales artificiales (RNA).

Las redes neuronales artificiales son sistemas de control necesarios para resolver los problemas en los que los métodos analíticos son difíciles de aplicar y sus resultados tienen que estar en un intervalo específico, por ejemplo, en tiempo real. El objetivo principal es el desarrollo de algoritmos matemáticos que permitan RNA´s aprender imitando el procesamiento de información y la adquisición de conocimientos en el cerebro humano. Los modelos de RNA`s contienen capas de nodos de computación sencillos que funcionan como dispositivos sumadores no lineales. Estos nodos están profundamente interconectados por líneas de conexión ponderadas, y los pesos son ajustados cuando se presentan los datos a la red durante un proceso de entrenamiento. Las redes neuronales artificiales pueden funcionar correctamente en la predecir un valor de salida, la clasificación de un objeto, la aproximación de una función, reconocer un patrón en datos multifactorial y completar una pauta conocida [1, 2].

En base a esto, el objetivo de este trabajo fue proporcionar una comprensión preliminar de RNA´s y contestar el por qué y cuando estas herramientas computacionales son necesarias, cómo se utilizan y sus posibles aplicaciones dentro de la industria alimentaria y dando como ejemplo principal, el sector del olivar y la industria del aceite de oliva. Un sector de aceite de oliva que está experimentando una evolución

tecnológica constante.

2. Similitudes entre redes neuronales biológicas (RNB) y redes neuronales artificiales (RNA).

2.1. *Neurona biológica*

El sistema nervioso humano consta de miles de millones de neuronas de diferentes tipos y longitudes de acuerdo con su ubicación en el cuerpo. Cada neurona comparte muchas características con otras células del cuerpo humano pero tiene propiedades especiales y particulares para recibir y transmitir una señal eléctrica a través de todas las interconexiones del sistema de comunicación del cerebro [3]. Algunas neuronas están conectadas a los receptores o efectores y otras están conectadas para transmitir y procesar información. El área de conexión se denomina sinapsis y enlaza el axón de una neurona a las dendritas de la neurona adyacente, como se muestra en la Figura.1.

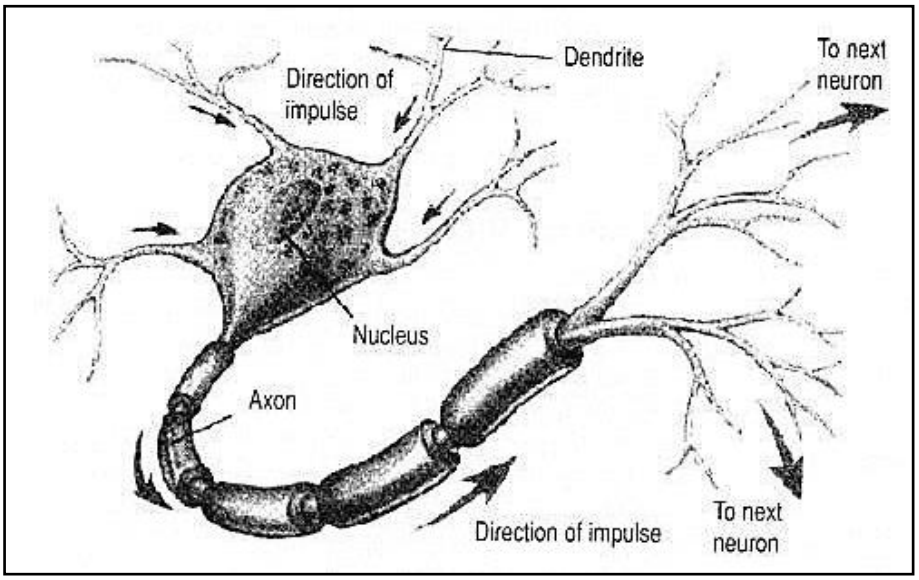


Figura 1. Estructura de una neurona biológica. Para comparar el rendimiento de neuronales artificiales debe conocer la estructura de una neurona biológica[4].

La información se transmite de una neurona a otra en forma de impulsos a través de las dendritas que tienden a excitar a la célula. Cuando la excitación acumulada supera un valor umbral, la neurona envía una señal a través del axón a otras neuronas. La mayoría de los modelos de RNA´s presentan el funcionamiento básico de la neurona [4].

2.2. *Neurona Artificial*

Las neuronas artificiales son modelos que tratan de simular el comportamiento de las neuronas biológicas. Cada neurona está representada por la unidad de procesamiento que forma parte de una entidad mayor: la red neuronal. En general, cada neurona recibe impulsos de otras unidades o de estímulos externos y calcula una señal de salida que propaga a otras unidades y, además, realiza un ajuste de sus pesos. Las señales de entrada son producidos por su sinapsis, sumando todas las influencias excitatorias (RNA simula mediante contrapesos positivos e inhibe por pesos negativos). Si las influencias positivas excitatorias dominan, la neurona da una señal positiva y envía este mensaje a otras neuronas por su salida. De acuerdo con la Figura 2, esta unidad de proceso (neurona artificial) consta de una serie de entradas Xi (x1, x2,...xn), que son equivalentes a las dendritas donde reciben información en forma de estimulación. Los pesos que existen en las sinapsis Wi son equivalentes a los mecanismos de transmisión en la neurona biológica. La unión de estos valores (Xi y Wi) equivale a las señales químicas inhibidoras y excitatorias que ocurren en la sinapsis e inducen a la neurona para cambiar su comportamiento. Estos valores son la entrada de la red de la función de ponderación que convierte estos valores en potencial.

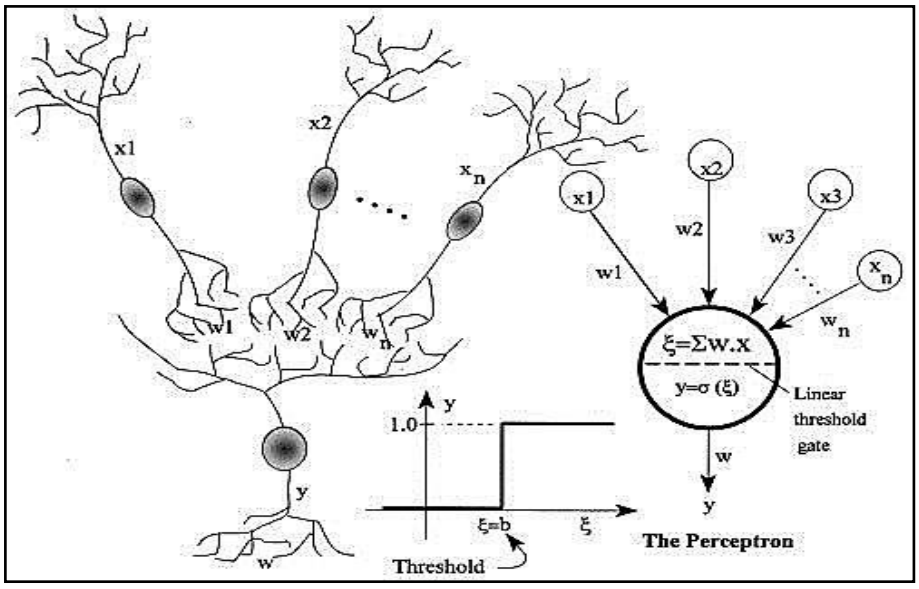
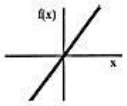
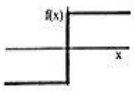
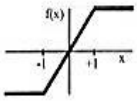
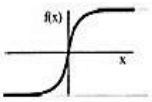
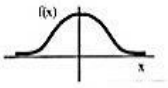
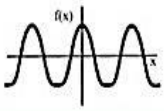


Figura 2. La similitud entre una neurona biológica y una neurona artificial. En esta figura se puede observar la diferencia entre ambos y de igual forma la neurona[4].

donde, *y*: es la salida de la neurona;ξ: es la función de transferencia de la neurona; *Wi*: es la matriz de pesos; σ:es la función de transferencia.

La función de ponderación es una suma ponderada de las entradas y los pesos sinápticos. La salida de la función de ponderación viene de la función de activación que transforma este valor en otra forma que las neuronas salidas pueden trabajar. La red de salida es evaluada en la función de activación que da lugar a esta salida de señal de neurona a otra vecina. La función de activación calcula la activación de la unidad en función de la entrada total y la activación previa, aunque en la mayor parte de los casos es simplemente una función no decreciente de la entrada total (Tabla 1). En resumen, la neurona artificial se comporta como una neurona biológica pero de una manera muy simplificada [3].

Tabla.1 Las funciones de activación de una red neuronal artificial. Estas funciones son necesarios pueden activar una RNA. Según el uso de la función de red que será diferente [4].

Name	Formula	Range	Graphical
Identity	$y = x$	$[-\infty, +\infty]$	
Unit step	$y = sign(x)$ $y = H(x)$	$\{-1, +1\}$ $\{0, +1\}$	
Piecewise linear	$y = \begin{cases} -1, \text{si } x < -l \\ x, \text{ si} + l \le x \le -l \\ +1, \text{si } x > +l \end{cases}$	$[-1, +1]$	
Sigmoid	$y = 1/(1 + e\hat{}(-x))$ $y = tgh(x)$	$[0, +1]$ $[-1, +1]$	
Gaussian	$y = Ae^{-Bx^2}$	$[0, +1]$	
Sinusoidal	$y = A\sin(\omega x + \varphi)$	$[-1, +1]$	

3. RNA: modelos, características, arquitectura, aprendizaje.

3.1. *Los modelos de redes neuronales artificiales*

En la Tabla 2 se pueden encontrar los principales y los modelos conocidos de redes neuronales artificiales.

Tabla 2. Resumen de los modelos de redes neuronales más conocidos (elaboración propia).

Name	Applications	Commentaries	Limitations	Year	Creators
Perceptron (P)	Recognition of characters printed	The oldest network	You may not recognize complex characters	1958	Rosemblatt
Adaline/Madaline	Filtering of signals. Equalizer Adaptive	Quick, easy implement with analog circuits	It is only possible classifying spaces linearly separated	1960	Widrow
Avalanche	Recognition of talks continued. Robot control	No network easy done these tasks	It is not easy to alter the speed or interpolate the movement	1967	Grossberg
Cerebellation	Control of the movement of arms of a robot	Similar to Avalanche	It requires complicated control inputs	1969	Marr, Albus,
Brain-State-Box	Extraction of knowledge database	Possibly best realization that SAS Hopfield networks	Potential realization applications not completely studied	1977	Anderson
Neocognitron	Recognition of characters manuscripts	Easy conceptualize. Insensitive to the translation, rotation and scale	It requires many elements of process, levels and connections	1978	Fukushima
Self-Organizing-Map (SOM)	Recognition of patterns, coding data optimization	Make maps features common of cough learned data	It requires a lot training	1980	Kohonen
Hopfield	Reconstruction patterns and optimization	Can be implemented in VLSI.	Capacity and stability	1982	Hopfield
Machines Boltzmann and Cauchy	Recognition patterns (images, sound and radar). Optimization	Simple networks. Capacity of representation optimal patterns	The machine of Bolzmann need a very long time learning	1985	Hinton
Associative memory bi-directional	Memory heteroasociativa access by content.	Learning and simple architecture	Low capacity storage. The data should be encoded	1985	Kosko
Adaptive resonance theory (ART)	Recognitionpatterns (radar, (sonar, etc.)	Sophisticated, little used	Sensitive to the translation, distortion and scale	1986	Carperrter, Grossberg
Counterpropagation	Understanding images	Combination of Perceptron and TPM	Many neurons and connections	1986	Hectnielsen
Back-propagation (BP)	Voice synthesis from text. Control robots. Forecast Recognition patterns	The most popular network. Numerous applications successfully. Ease of learning. Powerful.	It needs a lot of time for the learning and many examples	1986	Werbos, Parker, Rumelhart

3.2. *Características de una red neuronal artificial*

Las redes neuronales artificiales tienen un gran número de características similares al cerebro debido a su constitución y sus fundamentos, ya que pueden aprender de la

experiencia o entrenamiento [4]. Cada vez más, se utilizan en nuevas tecnologías en distintos campos y sectores presentando ventajas como:

- *La capacidad de aprendizaje adaptativo* que consiste en aprender cómo realizar algunas tareas de entrenamiento con ejemplos ilustrativos. Las redes neuronales son sistemas adaptativos dinámicos, debido a sus unidades de proceso. Las neuronas pueden adaptarse y cambiar según las nuevas condiciones en las que se encuentren. De hecho, una red neuronal puede generar su propia distribución del peso por medio de aprendizaje e incluso, después de esto, continuar entrenando. A la hora de diseñar una red neuronal tiene que tener la estructura apropiada para su correcto aprendizaje y entrenamiento con patrones. Es necesario desarrollar un buen algoritmo de aprendizaje que ayude a la red a discriminar cuando entrena con patrones.
- *La auto-organización*. Las redes neuronales emplean su capacidad de aprendizaje adaptativo para autoorganizar la información que reciben durante el entrenamiento y/u operación. De esta manera, son capaces de dar una respuesta a una nueva situación, resolviendo problemas en los que la información de entrada no es muy clara o incompleta.
- *La tolerancia a fallos.* Pueden tolerar fallos con respecto a los datos de las características esenciales de las entradas adquiridas, de modo que puede procesar correctamente los datos incompletos o distorsionados. Además, las redes pueden continuar su función (con cierta degradación) aunque destruya parte de la red. Esto es debido a que las redes neuronales tienen su información distribuida en las conexiones entre las neuronas. Estas conexiones tendrán sus valores según los estímulos recibidos, y un patrón de salida que representa la información almacenada que va a generar.
- *Operación en tiempo real.* Los cómputos neuronales pueden realizarse en paralelo. La mayoría de las redes pueden funcionar en un entorno de tiempo real debido a que la necesidad de un cambio en los pesos de las conexiones o entrenamiento es mínima.
- *Fácil inserción en la tecnología existente*. Una red puede ser rápidamente entrenada, probada, comprobada y transferida a una implementación de hardware [5].

3.3. *Arquitectura de una red neuronal*

La neurona artificial es un elemento de procesamiento sencillo que produce una salida desde un único vector de entradas. Al hablar de su arquitectura de se debe considerar:

•*Número de capas.* La distribución de las neuronas en la red neuronal se realiza formando capas de un número determinado de neuronas cada una. La arquitectura más usada la conforma la capa de entrada, que recibe la información del exterior, una serie de capas ocultas(intermedias), encargadas de realizar el trabajo de la red y una capa de salidas, que proporciona el resultado del trabajo de la red al exterior. El número de capas intermedias y el número de neuronas de cada capa dependerá del tipo de aplicación al que se vaya a destinar la red neuronal. No existe limitación en el número de capas ocultas. En general, cuanto mayor sea la diferencia entre los elementos de entrada y los de salida, será necesario dotar a la estructura de más capas ocultas. Estas capas ocultas crean una representación interna de los patrones de entrada. La capacidad de la red para procesar información crece en proporción directa al número de capas ocultas.

•*Los patrones de conexión*. Éstos vendrán dados en función de los vínculos entre los elementos de las diferentes capas. Una RNA puede ser clasificada como totalmente conectada, cuando todas las salidas desde un nivel puede llegar a todos y cada uno de los nodos del siguiente nivel. Cuando algunos enlaces en la red se pierden, la red se encuentra parcialmente conectada.

•*La dirección del flujo de información a través de las capas*. La conectividad entre las neuronas de una red neuronal está relacionada con la forma en que las salidas de las neuronas son dirigidas a convertirse en entradas de otras neuronas. La señal de salida de un nodo puede ser una de las entradas de otro elemento de proceso. Cuando los datos de las neuronas de una capa inferior son propagados hacia las neuronas de la capa superior por medio de las redes de conexiones hacia adelante y ninguna salida de las neuronas es entrada de neuronas de la misma capa o de capas precedentes, la red se describe como ‘feedforward’. Por el contrario, si al menos hay una conectada a la salida como entrada de neuronas de capas previas o de la misma capa, la red se denomina ‘feedback’ (retroalimentación). Las redes de retroalimentación que tienen al menos un bucle cerrado de propagación posterior se denominan recurrentes.

3.4. *Proceso de aprendizaje o entrenamiento*

El proceso de aprendizaje de las redes consiste en determinar con precisión los valores de los pesos para todas las conexiones, todos entrenados para la resolución eficiente de problemas. Durante la sesión de entrenamiento, los pesos convergen gradualmente a los valores que hacen de entrada para producir vector de salida deseado [3]. El final del período de entrenamiento puede ser determinado:

- usando un número fijo de ciclos,
- cuando el error cae por debajo de una cantidad preestablecida,
- cuando la modificación de los pesos es irrelevante.

Dependiendo del plan de aprendizaje y el problema que debe resolverse, se pueden distinguir tres tipos de esquemas de aprendizaje [4]:

✓*Aprendizaje supervisado*. En el entrenamiento, la supervisión de los conocimientos es controlada por un agente externo (supervisor), que vigila la supuesta respuesta que la red va a generar a partir de una determinada entrada. El supervisor compara la salida de la red con la que se esperaba y se determina la variación que se hizo en el peso. El objetivo es minimizar el error de la salida calculada. la diferencia entre la respuesta de la red y los valores deseados. Las RNA`s que utilizan este tipo de aprendizaje son Adaline, Multilayer Perceptrón (MPL), Backpropagation (BP) y memoria asociativa bidireccional.

✓*Aprendizaje no supervisado.* Las RNA´s con aprendizaje no supervisado (también conocido como auto-supervisado) no requieren ningún elemento externo para ajustar el peso de los enlaces de comunicación a sus neuronas. La red ajustará sus pesos utilizando una función de error o algún otro criterio. El principal problema de la clasificación no supervisada es dividir el espacio en el que los objetos se encuentran en grupos o categorías. Las RNA´s que utilizan este tipo de aprendizaje son Hopfield, máquinas de Boltzman and Cauchy, redes de aprendizaje competitivo, como Self-Organizing-Map (SOM) y el Adaptative Resonance Theory (ART).

4. RNA: Desarrollo e implantación

Para que el desarrollo de la implantación de una RNA dentro de un problema tenga éxito, tienen que desarrollarse una serie de etapas, como se ilustra en la Figura 3.

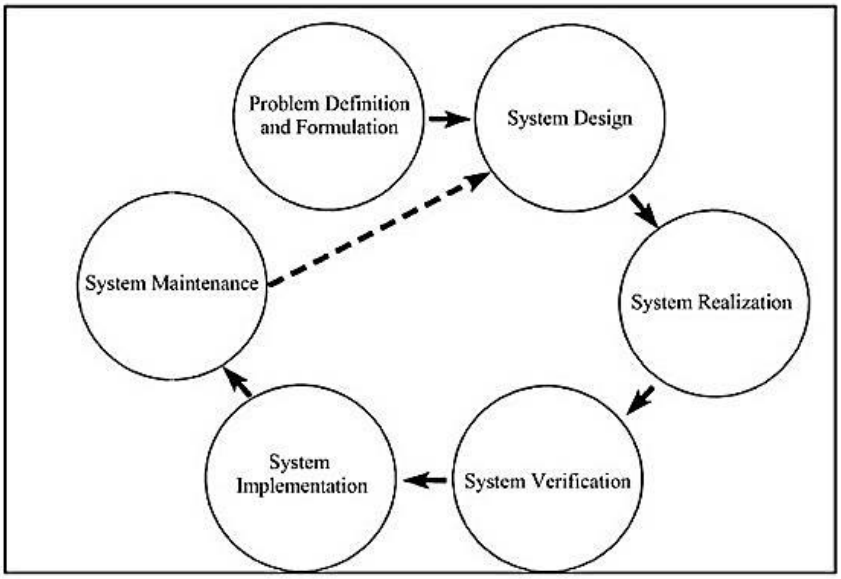


Figura 3. Las diversas fases de un proyecto de desarrollo de RNA. Estas etapas son fundamentales para el desempeño adecuado de RNA (elaboración propia).

4.1. *Definición del problema y la formulación*

En la primera fase, se debe definir el problema. Existen problemas de ingeniería para los cuales, encontrar la solución perfecta requiere una cantidad prácticamente imposible de recursos. RNAs pueden dar buenas soluciones a esta clase de problemas.

4.2. *El diseño del sistema*

A fin de seleccionar una buena configuración de redes, hay varios factores a tener en cuenta. Los principales puntos de interés acerca de la selección de la topología de la red están relacionados con el diseño de la red, entrenamiento y consideraciones prácticas. Algunas de las consideraciones de diseño incluyen la determinación del número de neuronas de entrada y salida, el número de capas ocultas en la red y el número de neuronas autilizadas en cada capa oculta. El número de nodos de entrada es

normalmente el mismo que el número de variables de estado. El número de nodos de salida normalmente es el número que identifica la categoría general del estado del sistema. Cada nodo representa un elemento de procesamiento y está conectado a través de diversos pesos para otros elementos. A fin de predecir con los menos errores posibles, estos valores deben ser optimizados.

Los datos deben ser suficientemente grandes para cubrir la posible variación en el dominio del problema. Esta base de datos en tres subconjuntos de entrenamiento-test y validación. Las muestras que componen la entrada y la salida deben tener el mismo formato y deben ser normalizadas en el rango de 0 - 1, ó -1 - 1 dependiendo de la función de transferencia utilizada. Los pesos iniciales de la red juegan un papel importante en la convergencia del método de entrenamiento. Conociendo los datos de entrada y datos de salida y los objetivos a conseguir, podemos diseñar la RNA. Primero hay que elegir el tipo de RNA y una vez definida la topología es necesario establecer algoritmo que permite una correcta adecuación de los parámetros internos de la red.

4.3. *Realización del sistema*

En la realización del sistema se lleva acabo uno de los dos pasos básicos, el entrenamiento-aprendizaje. En esta etapa, los parámetros de conexión se ajustan con la función de activación que presenta la Tab. 1, de tal modo que, para un conjunto de datos dado, la red neuronal predice un conjunto de datos de salida similares o iguales a los datos de salida reales. La etapa de entrenamiento es influenciada por varios parámetros (tamaño de la red, velocidad de aprendizaje, número de iteraciones, error aceptable, etc.) que pueden afectar al diseño de la red definitiva ya su error. Por ello, se debe considerar las variables de entrada y de salida, eligiendo el adecuado tamaño del conjunto de datos de entrenamiento, inicializando los pesos de red, eligiendo los parámetros del entrenamiento (como la tasa de aprendizaje y ‘momentum rate’), seleccionando los criterios de parada del entrenamiento, importantes para varias topologías de red. En función del tipo de RNA, se opta por el tipo de aprendizaje supervisado o no supervisado. El número de iteraciones realizados durante el entrenamiento para enseñar a una RNA, a veces es crítica para que el proceso de aprendizaje tenga éxito. Si el número de iteraciones realizados no es suficiente, la red no podrá aprender correctamente la relación existente entre la entrada y salida del sistema. Si el número de iteraciones de entrenamiento es demasiado grande, la red

estará sobreentrenada obteniendo errores. Para algunas aplicaciones, como en control en tiempo real a través de una neuronal adaptativa, el tiempo de entrenamiento es un factor crítico.

4.4. *Verificación del sistema*

La verificación es realizada para confirmar la capacidad del modelo basado RNA para responder con precisión a casos diferentes no utilizados en el desarrollo de la red. Para cada función de entrenamiento, la matriz de peso debe ser optimizada en su respectivo proceso de aprendizaje. En el proceso de verificación, los datos obtenidos por RNA deben ser comparadas con los reales para optimizar los parámetros de las RNA mediante herramientas estadísticas, una vez optimizados, el proceso de validación comprueba su veracidad y funcionamiento.

4.5. *La implementación del sistema*

Esta fase incluye la incorporación de la red obtenida en un sistema de trabajo adecuado como controlador de hardware o programa de ordenador, dependiendo de la función que tengan las RNA, como pueden ser los procesos de optimización, de control o predicción on-line.

4.6. *Mantenimiento del sistema*

Esta etapa incluye la actualización del medio, cambios en las variables y/o nuevos datos que influyen en el desarrollo de la red.

5. Aplicaciones de redes neuronales

Las RNAs debido a que son tecnologías informáticas emergentes se pueden utilizar en un gran número y variedad de aplicaciones tales como, el control, la monitorización y la modelización, el reconocimiento, detección y búsqueda de patrones, la predicción en línea, el procesamiento de imágenes, la optimización y el procesamiento de señales. Estas aplicaciones se pueden utilizar en diversos campos como la industria manufacturera, la agricultura, en negocios económicos, en marketing, en medicina, en los transportes, la energía, en el comercio mayor, etc… En este apartado se puede ver algunos ejemplos de los diversos usos que tiene una red neuronal artificial en la

industria alimentaria.

5.1. *El control, la monitorización y la modelización de procesos industriales*

En la actualidad, la industria tiene una serie de objetivos: mejorar la calidad de los productos, reducción de residuos, eliminación de toxinas o sustancias contaminantes y, sobre todo, el aumento de los beneficios, y todo ello mejorando la eficiencia de la industria. Por esta razón, las redes neuronales son implantadas en control, modelado y control de los procesos industriales existentes, incrementando así la producción en número, en calidad y reduciendo los costes de fabricación misma, como puede verse en los distintos artículos referidos en la Tabla 3.

Tabla.3. Varios ejemplos de aplicación del control, la monitorización y la modelización de procesos industriales (elaboración propia).

Sample	Object of investigation	Type of ANN	References
Food in general	Modeling and control of a food extrusion process using ANN	BP	Popescu *et al.*, (2001) [5]
	Modeling sterilization process of canned foods ANNs	BP	Gonçalves, *et al.*, (2005) [6]
	Prediction models and for optimization of constant temperature retort (CRT) thermal processing of conduction heating foods using ANN.	Non defined	Chen, and Ramaswamy, (2002) [7]
	Application of ANN in the modelling of the thermal treatment of food	RNN, BP	Luera Peña, Minim, (2001) [8]
Apple	ANN modeling of apple drying process.	MLPFF	Khoshhal, *et al.*, (2010) [9]
Apple juice	Modeling dead-end ultrafiltration of apple juice using ANN	MLPFF, BP	Gökmen, *et al.*, (2009) [10]
Bread	Dynamic model of the kneading process based on ANN that allows predicting the bread dough temperature and the delivered power	RNN	Lamrini, *et al.*, (2012) [11]
Lime	ANN modeling of mass transfer during osmotic dehydration of kaffir lime peel.	MLPFF	Lertworasirikul, Saetan, (2010) [12]
Squid protein	Modeling of squid protein hydrolysis using ANN	MLP	Abakarov, *et al.*, (2011) [13]
Tomato	Modeling of tomato drying using ANN	MLP	Movaghamejad, Nikza, (2007) [14]
Viscous fluids	Neural network modeling of end-over-end thermal processing of particulates in viscous fluids	MLP BP	Meng and Ramaswamy, (2010) [15]
Wheat	Modeling of wheat soaking using two ANNs	MLP, RBF	Kashaninejad, (2009) [16]
Wine	Modeling wine characteristics using ANN	MLPFF, BP	Vlassides, *et al.*, (2001) [17]

5.2. *Reconocimiento, detección, clasificación y búsqueda de patrones.*

Las RNA son empleadas para el reconocimiento, la detección, la clasificación y la búsqueda de patrones. Varios ejemplos pueden apreciarse en la Tabla 4 como la clasificación de semillas o manzanas en tiempo real a través de imágenes digitales, análisis de su textura y color, la detección de defectos en las cerezas o el reconocimiento de patrones de fruta forma cuantitativa entre otros.

Tabla. 4. Distintos trabajos de aplicación de reconocimiento, detección, clasificación e investigación de patrones (elaboración propia).

Sample	Object of investigation	Type of ANN	References
Apple	Develop ANN-based apple classifier	MLP, BP	Bhatt *et al*., (2014) [18]
	Apple classification system based on machine vision and ANN, which classifies apple in real time on the basis of physical parameters of apple such as size, color and external defects.	MLP, BP	Bhatt and Pant, (2013) [19]
	Classification of apple surface features using machine vision and ANN	MLPFF	Yang, (1993) [20]
Beans	Classification of beans using computer vision system and ANNs	MLPFF	Kılıc *et al*., (2007) [21]
Boiled shrimp	Classifications of boiled shrimp's shape using image analysis and ANN model.	MLP	Poonnoy *et al*., (2014) [22]
Cherries	Use of genetic artificial neural networks and spectral imaging for defect detection on cherries	MLPFF, BP	Guyer and Xiukun Yang, (2000) [23]
Food in general	A new pattern recognition method for detecting fouling on stainless steel is presented in food processing.	MLPFF, BP	Wallhäußer *et al*., (2011) [24]
Fruits	Pattern recognition of fruit shape quantitatively with ANN	SOM	Morimoto *et al*., (2000) [25]
Grape	Determination of anthocyanin concentration in whole grape skins using hyperspectral imaging and adaptive boosting ANN	MLPFF	Fernandes *et al*., (2011) [26]
Lamb	Classification according to prediction the lamb carcass grades using features extracted from lamb chop images	MLP	Chandraratne *et al*., (2007) [27]
Pig muscles	Duroc and Iberian pork neural network classification by visible and near infrared reflectance spectroscopy	RBF	Del Moral. *et al*., (2009) [28]
The starch of potato, cassava, corn	Classify the data set and to predict mechanical properties (tensile strength and strain at break of starch-based films using ANN	MLPFF	Dieulot and Skurtys, (2013) [29]
Wine	Prediction of problematic wine fermentations using ANN	MLP, BP	Román *et al*., (2011) [30]

5.3. *Predicción de parámetros en línea*

En la industria alimentaria, la RNAs son muy utilizados, en general para predecir la calidad en línea así como las características de los alimentos o la predicción de las temperaturas para el almacenamiento de los alimentos. La Tabla 5 muestra algunas de las diversas aplicaciones de los distintos tipos de redes en la industria alimentaria.

Tabla. 5. Varios ejemplos de aplicación en línea de predicción de parámetros (elaboración propia).

Sample	Object of investigation	Type of ANN	References
Agricultural products	ANN method to predict the drying characteristics of agricultural products such as hazelnut, bean and chickpea	MLPFF, BP	Topuz (2010) [31]
Carrot	Predicting properties of dried carrot based on composition, drying technique, and microstructural features	P	Kerdpiboon, *et al.*, (2006) [32]
Cheese	Predicting the final process time in the acidification step for cheese production.	P	Jun-ichiHoriuchi, *et al.*, (2004) [33]
Chicken	Predicting the final temperature of chicken carcasses in an industrial scale using ANN	MLPFF, BP	Silveira, *et al.* (2014) [34]
Chicken nuggets	Developing a model to predict the mechanical textural properties of the fried breaded chicken nuggets by using image texture processing	MLPFF	Qiao *et al.*, (2007) [35]
Corn	Artificial neural networks to predict corn yield	MLPFF, BP	Uno *et al.*, (2005) [36]
Crackers	Moisture content and water activity prediction of semi-finished cassava crackers from drying process with ANN	MLPFF	Lertworasirikul and Tipsuwan, (2008) [37]
Fresh outcrop milk cream	Discriminating season of production and feeding regimen of butters based on infrared spectroscopy and ANN	MLP	Gori *et al.*, (2012) [38]
Food in general	Predicting of cold spot temperature in retort sterilization of starch-based foods	BP	Llave *et al.*, (2012) [39]
	Predicting the internal texture characteristics from extrusion food surface images with ANN	MLPFF, BP	Fan *et al.*, (2013) [40]
	Predicting of thermal conductivity of food as a function of moisture content, temperature and apparent porosity.	MLPFF, BP	Sablani, and Rahman, (2003) [41]
Grain	Predicting the moisture content of grain drying process using genetic algorithm	BP, RBF	Liu, *et al.*, (2007) [42]
Ice cream	Predicting total acceptance of ice cream using ANN	MLPFF	Bahramparvar, *et al.*, (2013) [43]
Meal of beef	Predicting shrinkage of ellipsoid beef joints as affected by water immersion cooking using image analysis and ANN	BP	Zheng *et al.*, (2007) [44]
Molasses vinegar	Prediction by ANN of the physicochemical quality of cane molasses vinegar by time-temperature effect of food to flash evaporator-distiller	MLPFF, BP	Vásquez and Lescano, (2010) [45]
Oils	ANN as an alternative to other methods utilized to determine the fatty acid composition of oils.	MLPFF	Yalcin *et al.*, (2012) [46]
Orange juice	Predicting physical properties of orange juice powder as well as process parameters in spray dryers.	MLPFF	Chegini *et al.*, (2008) [47]
Orange, peach, pear	Predicting of viscosity of fruit juice as a function of concentration and temperature.	MLP	Rai *et al.*, (2005) [48]
Peas	Predicting maturity index peas with ANN	MLP	Higginsa *et al.*, (2010) [49]
Peppers	Predicting of storage quality of fresh-cut green peppers using ANN	MLPFF, BP	Meng, *et al.*, (2012) [50]
Processing food in general	Predicting process parameters involved in thermal/pressure food processing using ANN	BP	Torrecilla *et al.*, (2004) [51]
Plum juice	Predicting the permeate flux of red plum juice during membrane clarification	MLPFF	Nourbakhsh *et al.*, (2014) [52]
Seeds	Predicting deoxynivalenol accumulation in barley seeds contaminated with Fusariumculmorum under different conditions	MLP, RBF	Mateo *et al.*, (2011) [53]

Viscous non-Newtonian fluid food	Apply the ANN to predict the pressure gradients in tube flow of viscous non-Newtonian fluid foods.	BP	Adhikari and Jindal (2000) [54]
Wheat flour	Predicting the correlation between farinographic properties of wheat flour dough and its chemical composition	MLPFF	Razmi-Rad *et al*., (2007) [55]
	Prediction of extensograph properties of wheat-flour dough: ANN	MLPFF	Abbasi *et al*., (2012) [56]
Wine	Predicting the sensorial qualities of wines	SOM	Curvelo *et al*., (2010) [57]
Yacon	Prediction by ANN of the diffusivity, mass, moisture, volume and solids on osmotically dehydrated yacon	MLPFF, BP	Rojas and Vásquez, (2012) [58]

5.4. *Procesamiento de imágenes*

Más de 200 aplicaciones de las redes neuronales en el procesamiento de imágenes confirman la presente y la futura aplicación de las redes neuronales, especialmente del tipo feed-forward, mapas de Kohonen y Hop1eld. En la industria alimentaria, el método de procesamiento de imágenes se ha vuelto muy popular e indirectamente utilizado para determinar, por ejemplo, el contenido de azúcar. Así lo corroboran los altos coeficientes de correlación obtenidos entre el contenido de azúcar y el valor rojo en las coordenadas cromáticas de cáscaras de plátano[60] o en la gradación de color de las manzanas[61].

5.5. *Optimización*

En general, el objetivo de la optimización es asignar una cantidad limitada de recursos para un conjunto de determinadas tareas parciales de tal manera que los costes se minimizen u otros objetivos se maximizen. Dentro de un proceso afectan diversas variables que deben combinarse para llegar al óptimo de eficiencia y eficacia del proceso consiguiendo los objetivos definidos. En la Tabla 6 se pueden observar algunos ejemplos de optimización de las condiciones del proceso de elaboración de alimentos o condiciones de almacenamiento de las verduras y frutas, entre otros.

Tabla. 6. Diferentes aplicaciones de optimización (elaboración propia).

Sample	Object of investigation	Type of ANN	References
Corn germ	Modeling syrup production process from defatted corn germ	MLPFF BP	Millán and Gil, (2011) [61]
Food in general	Design and optimize high-pressure food processes	MLPFF BP	Torrecilla *et al*., (2005), (2007) [62] [63]
Foodstuffs	Optimization the operating conditions on heat and mass transfer during foodstuffs drying	MLPFF	Hernández, (2009) [64]
Fruit	Optimization of heat treatment for fruit during storage using ANN	MLPFF	Morimoto *et al*., (1997) [65]
	Realizing the optimal control of the fruit-storage process.	MLPFF	Morimoto *et al*., (1997) [66]

5.6. *Procesamiento de señal*

Desde una perspectiva de procesamiento de señal, es imperativo elaborar una comprensión adecuada de las estructuras básicas de red neuronal y cómo influyen en los algoritmos de procesamiento de señales y sus aplicaciones. Un desafío dentro de las redes neurales es identificar las estructuras que han sido aplicadas con éxito para resolver problemas en el mundo real, en aquellos que aún están en desarrollo. Cuando se trata de aplicaciones de procesamiento de señal, es fundamental para entender la naturaleza de la formulación del problema, de modo que el paradigma de redes neuronales más apropiado puede ser aplicado. Además, también es importante evaluar el impacto de las redes neuronales en el rendimiento, robustez, y el coste-efectividad de los sistemas de procesamiento de señales y desarrollar metodologías para la integración de redes neuronales con otros algoritmos de procesamiento de señales, es por ello, su aplicación en diferentes sectores e industrias. Dentro de la industria alimentaria, se puede encontrar varias investigaciones., por ejemplo, para clasificar las muestras de carne de res almacenados en dos grupos: fresco y estropeado por la presencia de población microbiana. Las redes se utilizan como alternativa al ruido electrónico [68].

6. Aplicaciones en el sector del aceite de oliva.

En este sector, las redes neuronales artificiales tienen diferentes aplicaciones: para clasificar la aceituna para su procesamiento, testar el estado de madurez de los frutos, detectar los fraudes o adulteraciones con otras grasas o para predecir las características

del aceite de oliva obtenido y a optimizar el proceso de extracción del aceite de oliva.

Por ejemplo, RNA´s fueron Las RNA fue empleado para la clasificación de fruta según la variedad de oliva, como una herramienta para garantizar la autenticidad de la variedad. En este estudio, se recogieron seis variedades de olivo de la región de Trás-os-Montes en diferentes campos de y durante cuatro años de cultivo. Diez parámetros biométricos se midieron y se utilizaron para el análisis discriminante lineal (LDA) y el desarrollo ANN modelo de clasificación. En este trabajo, las redes de clasificación MPLFF individuales, utilizaron un algoritmo de aprendizaje supervisado. La metodología MLP demostró ser una herramienta práctica y eficaz para la clasificación de aceitunas, que muestra una alta sensibilidad y especificidad global, incluso para muestras desconocidas (76% y 78% para el conjunto de datos de validación, respectivamente). Con este trabajo entre otros, los productores de aceite de oliva pueden prevenir posibles adulteraciones de aceite de oliva con aceitunas de las variedades no permitidas, de acuerdo con la Denominación de Origen Protegida (DPO) o regulaciones oficiales del aceite de oliva monovarietal [69].

En otra investigación se muestra un método novedoso para la predicción del índice de maduración de un lote de aceitunas de forma rápida y automática [70]. Junto con las redes neuronales del tipo BP, se utiliza un sistema de Visión Artificial, capaz de predecir el índice de madurez de la materia prima a partir del conjunto de parámetros químicos (contenido de aceite, el contenido de azúcar y contenido de fenol) y bajo el entrenamiento de gradiente ascendente gradiente algoritmo con un ritmo de aprendizaje adaptativo. Por otra parte, una red tipo bakpropagation con el algoritmo de Levenberg-Marquardt es utilizada por Ram et al., (2010) para predecir la cantidad de aceite junto con junto con modelos de regresiones lineales (MLR), así como, la calidad del mismo mediante algoritmos de procesamiento de imágenes, siendo las redes más precisos que la regresión lineal [71].

Debido a los recientes cambios en el comportamiento de compra de los consumidores, el interés de éstos se ha visto influenciado por la trazabilidad geográfica de los alimentos. En lo que se refiere a los aceites de oliva vírgenes, esta información se considera una garantía adicional de su calidad, autenticidad y seguridad. Para este

objetivo, García- González D. *et al.*, (2009) propone una nueva metodología basada en perceptrón multicapa. Un tipo de RNA que ha sido aplicado a las principales series de compuestos analizados en aceites para determinar el origen geográfico del aceite de oliva virgen desde el país hasta la región y DOP [72]. Por otra parte, Torrecilla *et al.*, (2013) se unió a la clasificación de los aceites de oliva virgen extra (EVOO) utilizando RNA´s a partir de varios parámetros, tales como la acidez, índice de peróxido, K_{232}, K_{270}, ΔK, humedad y compuestos volátiles. Esta clasificación fue hecha dentro de DOP. Para detectar adulteraciones [73], algunos investigadores utilizaron un mapa auto-organizados (SOM) para clasificar señales de UV-vis de aceite de oliva virgen extra puro, muestras adulteradas diferentes aditivos y muestras con la adición de dos diferentes tipos de ruidos. Esta herramienta es eficaz aunque todavía requiere una optimización. Este tipo de red fue utilizada por Marini *et al.*, (2007), junto con un perceptrón multicapa retroalimentada [74]. Zupan *et al.*, (1994) también utilizó RNA´s para clasificar los aceites de oliva, la cual, se realizó a través de análisis de ocho ácidos grasos de los aceites de oliva italianos. En esta investigación, BP y Kohonen fueron comparados cuyas predicciones se aproximaron al 95% [75].

Las RNA´s también tienen otra función en el sector del aceite de oliva, dentro del proceso de extracción del aceite de oliva. Furferi *et al.*, 2007, 2008, el desarrollo de redes neuronales artificiales para predecir los dos parámetros: nivel de acidez y peróxidos del aceite de oliva obtenidos en continuo en el proceso de extracción, permitiendo un control en tiempo real de la calidad del aceite durante el proceso de extracción. BP fue utilizado en dos diferentes refiriéndose a una red neuronal de 3 fases y 2 fases decantación tecnología que los resultados obtenidos son aceptables [76, 77].

Por otro lado, RNAs pueden utilizarse adecuadamente para estimar la concentración de compuestos fenólicos en el agua residual de la almazara cuya carga contaminante es de alto impacto ambiental, y todo ello, sin ningún conocimiento fenológico anterior [78]. El tipo de RNA usada en este trabajo fue un BP con conexiones feed-forward entre neuronas con aprendizaje supervisado. Las RNA´s desarrolladas y optimizadas fueron capaces de predecir la concentración de ácido caféico en el agua residual. Esta investigación tuvo importantes resultados con diferencias entre los datos reales y los valores pronosticados fueron alrededor de 5%. En otro estudio realizado por el mismo grupo de investigadores, se diseñó un sistema integrado de red neural artificial

(RNA)/laccase biosensor para predicción de concentración cathecol en las aguas residuales del proceso de extracción del aceite de oliva con errores entre datos reales y estimados de menos del 1% [79].

Otros investigadores como Bordons y Cueli en (2004), desarrollaron un controlador predictivo de las alteraciones medibles en el proceso de extracción en del aceite, centrándose en el tratamiento térmico del mismo [80]. Otros investigadores utilizaron las RNA´s como herramienta para la optimización del proceso de elaboración del aceite de oliva. Este es el caso de Jiménez *et al.*, 2008, 2009[81, 2]. En este trabajo los autores construyeron RNA´s para predecir en tiempo real la humedad y el contenido de grasa en el aceite de orujo de oliva en un sistema dos fases. Con ayuda del sistema AOTF-NIR que se obtuvo un espectro de aceite del decantador horizontal y junto con el análisis de datos, se desarrollaron RNA's del tipo BPFF. Con las predicciones obtenidas, los autores pretendían regular de forma rápida las variables tecnológicas para minimizar la pérdida de grasa.

7. Conclusiones

En esta revisión, el lector puede introducirse en el mundo de las RNA's, descubriendo sus principales características y su proceso de creación. Aunque lo fundamental es la diversidad de aplicaciones que poseen las redes neuronales. En diversos sectores las utilidades de las redes son infinitas por su capacidad para aprender de ejemplos que proporcionan la solución eficiente de problemas complejos, de hecho, el alto el interés en las RNA's sigue creciendo para optimizar, mejorar, resolver, controlar o modelar cualquier clase de problemas que pueden aparecer.

Referencias

[1] Basheer, I.A. and Hajmeer, M. (2000) Artificial Neural Networks: Fundamentals, Computing, Design, and Application.*Journal of Microbiological Methods*, **43**, 3-31. http://dx.doi.org/10.1016/S0167-7012(00)00201-3

[2] Jiménez, A., Aguilera, M.P., Uceda, M. and Beltrán, G. (2009) Neural Network as Tool for Virgin Olive Oil Elabora- tion Process Optimization. *Journal of FoodEngineering*, **95**, 135-141. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2009.04.021

[3] BasogainOlabe, X. (2005) Artificial Neural Networks and Their Applications. School of Engineering, Bilbao.

[4] Matich, D.J. (2001) Neural Networks: Basic Concepts and Applications. National University of Technology—Faculty Regional Rosario. Group of Applied Research in the Chemical Engineering (GIAIQ).

[5] Popescu, O., Popescu, D., Wilder, J. and Karwe, M. (2001) A New Approach to Modelling and Control of a Food Ex- trusion Process Using Artificial Neural Network and an Expert System. *Journal of Food Process Engineering*, **24**, 17- 36. http://dx.doi.org/10.1111/j.1745-4530.2001.tb00529.x

[6] Gonçalves, E.C., Minim, LA., Coimbra, J.S.R. and Minim, V.P.R. (2005) Modeling Sterilization Process of Canned Foods Using Artificial Neural Networks. *Chemical Engineering and Processing*, **44**, 1269-1276. http://dx.doi.org/10.1016/j.cep.2005.04.001

[7] Chen, C.R. and Ramaswamy, H.S. (2002) Modeling and Optimization of Constant Retort Temperature (CRT) Thermal Processing Using Coupled Neural Networks and Genetic Algorithms. *Journal of Food Process Engineering*, **25**, 351- 379. http://dx.doi.org/10.1111/j.1745-4530.2002.tb00571.x

[8] Luera Peña, W.E. and Minim, L.A. (2001) Application of Neural Networks in the Modelling of the Thermal Treatment of Food. *LWT-Food Science and Technology*, **3**, 81-88.

[9] Khoshhal, A., Dakhel, A., Etemadi, A. and Zereshk, S. (2010) Artificial Neural Network Modeling of Apple Drying Process. *Journal of Food Process Engineering*, **33**, 298-313. http://dx.doi.org/10.1111/j.1745-4530.2009.00435.x

[10] Gökmen, V., Açar, O.C., Serpen, A. and Süğüt, I. (2009) Modeling Dead-End Ultrafiltration of Apple Juice Using Ar- tificial Neural Network. *Journal of FoodProcessEngineering*, **32**, 248-264. http://dx.doi.org/10.1111/j.1745-4530.2007.00214.x

[11] Lamrini, B., Della Valle, G., TreleaPerrot, I.C. and Trystram, G. (2012) A New Method for Dynamic Modeling of Bread Dough Kneading Based on Artificial Neural Network. *Food Control*, **26**, 512-524.

[12] Lertworasirikul, S. and Saetan, S. (2010) Artificial Neural Network Modeling of Mass Transfer during Osmotic Dehy- dration of Kaffir Lime Peel. *Journal of Food Engineering*, **98**, 214-223.

[13] Abakarov, A., Teixeira, A., Simpson, R., Pinto, M. and Almonaci, S. (2011) Modeling of Squid Protein Hydrolysis: Artificial Neural Network Approach. *Journal of Food Process Engineering*, **34**, 2026-2046. http://dx.doi.org/10.1111/j.1745-4530.2009.00567.x

[14] Movagharnejad, K. and Nikzad, M. (2007) Modeling of Tomato Drying Using Artificial Neural Network. *Computers and Electronics in Agriculture*, **59**, 78-85. http://dx.doi.org/10.1016/j.compag.2007.05.003

[15] Meng, Y. and Ramaswamy, H.S. (2010) Neural Network Modeling of End-over-End Thermal Processing of Particu- lates in Viscous Fluids. *Journal of Food Process Engineering*, **33**, 23-47. http://dx.doi.org/10.1111/j.17454530.2008.00272.x

[16] Kashaninejad, M., Dehghani, A.A. and Kashiri, M. (2009) Modeling of Wheat Soaking Using Two Artificial Neural Networks (MLP and RBF). *Journal of Food Engineering*, **91**, 602-607. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2008.10.012

[17] Vlassides, S., Ferrier, J.G. and Block, D.E. (2001) Using Historical Data for Bioprocess Optimization: Modeling Wine Characteristics Using Artificial Neural Networks and Archived Process Information. *Biotechnology and Bioengineering*, **73**, 55-68. http://dx.doi.org/10.1002/1097-0290(20010405)73:1<55::AID-BIT1036>3.0. CO;2-5

[18] Bhat, A.K. (2014) An Analysis of the Performance of Artificial Neural Network Technique for Apple Classification. *AI & Society*, **29**, 103-111. http://dx.doi.org/10.1007/s00146-012-0425-z

[19] Bhatt, A.K. and Pant, D. (2013) Automatic Apple Grading Model Development Based on Back Propagation Neural Network and Machine Vision, and Its Performance Evaluation. *AI & Society*, **30**, 45-56.

[20] Yang, Q. (1993) Classification of Apple Surface Features Using Machine Vision and Neural Networks. *Computers and Electronics in Agriculture*, **9**, 1-12. http://dx.doi.org/10.1016/0168-1699(93)90025-V

[21] Kılıç, K., Boyaci, H.I., Koecsel, H. and Kuesmenoglu, I. (2007) A Classification System for Beans Using Computer Vision System and Artificial Neural Networks. *Journal of Food Engineering*, **78**, 897-904. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2005.11.030

[22] Poonnoy, P., Yodkeaw, P., Sriwai, A., Umongkol, P. and Intamoon, S. (2014) Classification of Boiled Shrimp's Shape Using Image Analysis and Artificial Neural Network Model. *Journal of Food Process Engineering*, **37**, 257-263.

[23] Guyer, D. and Yang, X. (2000) Use of Genetic Artificial Neural Networks and Spectral Imaging for Defect Detection on Cherries. *Computers and Electronics in Agriculture*, **29**, 179-194. http://dx.doi.org/10.1016/S0168-1699(00)00146-0

[24] Wallhäußer, E., Hussein, W.B., Hussein, M.A., Hinrichs, J. and Becker, T.M. (2011) On the Usage of Acoustic Proper- ties Combined with an Artificial Neural Network—A New Approach of Determining Presence of Dairy Fouling. *Journal*

of Food Engineering, **103**, 449-456. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng. 2010.11.015

[25] Morimoto, T., Takeuchi, T., Miyata, H. and Hashimoto, Y. (2000) Pattern Recognition of Fruit Shape Based on the Concept of Chaos and Neural Networks. *Computers and Electronics in Agriculture*, **26**, 171-186. http://dx.doi.org/10.1016/S0168-1699(00)00070-3

[26] Fernandes, A.M., Oliveira, P., Moura, J.P., Oliveira, A.A., Falco, V., Correia, M.J. and Melo-Pinto, P. (2011) Deter- mination of Anthocyanin Concentration in Whole Grape Skins Using Hyperspectral Imaging and Adaptive Boosting Neural Networks. *Journal of Food Engineering*, **105**, 216-226. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2011.02.018

[27] Chandraratne, M.R., Kulasiri, D. and Samarasinghe, S. (2007) Classification of Lamb Carcass Using Machine Vision: Comparison of Statistical and Neural Network Analyses. *Journal of Food Engineering*, **82**, 26-34. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2007.01.003

[28] Del Moral, F.G., Guillén del Moral, L.G., O'Vallea, F. and Martínez del Moral, R.G. (2009) Duroc and Iberian Pork Neural Network Classification by Visible and Near Infrared Reflectance Spectroscopy. *Journal of Food Engineering*, **90**, 540-547. http://dx.doi.org/10.1016/ j.jfoodeng.2008.07.027

[29] Dieulot, J.-Y. and Skurtys, O. (2013) Classification, Modeling and Prediction of the Mechanical Behavior of Starch- Based Films. *Journal of Food Engineering*, **119**, 188-195. http://dx.doi.org/ 10.1016/j.jfoodeng.2013.05.028

[30] Román, C., Hernández, O.G. and Urtubia, U.A. (2011) Prediction of Problematic Wine Fermentations Using Artificial Neural Networks. *Bioprocess and Biosystem Engineering*, **34**, 1057-1065.

[31] Topuz, A. (2010) Predicting Moisture Content of Agricultural Products Using Artificial Neural Networks. *Advances in Engineering Software*, **41**, 464-470. http://dx.doi.org/10.1016/ j.advengsoft.2009.10.003

[32] Kerdpiboon, S., Kerr, W. and Devahastin, S. (2006) Neural Network Prediction of Physical Property Changes of Dried Carrot as a Function of Fractal Dimension and Moisture Content. *Food Research International*, **39**, 1110-1118. http://dx.doi.org/10.1016/j.foodres.2006.07.019

[33] Horiuchi, J., Shimada, T., Funahashi, H., Tada, K., Kobayashi, M. and Kanno, T. (2004) Artificial Neural Network Model with a Culture Database for Prediction of Acidification Step in Cheese Production. *Journal of Food Engine- ering*, **63**, 459-465. http://dx.doi.org/10.1016/ j.jfoodeng.2003.09.005

[34] Silveira, C., Belledeli, B.D., Soares, M.B.A., Treichel, H. and Mazutti, M.A. (2014) Use of Artificial Neural Network for Industrial Prediction of Final Temperature of Chicken Carcasses. *Journal of Food Process Engineering*, **37**, 1-9. http://dx.doi.org/10.1111/jfpe.12053

[35] Qiao, J., Wang, N., Ngadi, M.O. and Kazemi, S. (2007) Predicting Mechanical Properties of Fried Chicken Nuggets Using Image Processing and Neural Network Techniques. *Journal of Food Engineering*, **79**, 1065-1070. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2006.03.026

[36] Uno, Y., Prasher, S.O., Lacroix, R., Goel, P.K., Karimi, Y., Viau, A. and Patel, R.M. (2005) Artificial Neural Networks to Predict Corn Yield from Compact Airborne Spectrographic Imager Data. *Computers and Electronics in Agriculture*, **47**, 149-161. http://dx.doi.org/10.1016/ j.compag.2004.11.014

[37] Lertworasiriku, S. and Tipsuwan, Y. (2008) Moisture Content and Water Activity Prediction of Semi-Finished Cassava Crackers from Drying Process with Artificial Neural Network. *Journal of Food Engineering*, **84**, 65-74. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2007.04.019

[38] Gori, A., Cevoli, A., Fabbri, A., Cavoni, M.F. and Losi, G. (2012) A Rapid Method to Discriminate Season of Produc- tion and Feeding Regimen of Butters Based on Infrared Spectroscopy and Artificial Neural Networks. *Journal of Food Engineering*, **109**, 525-530. http://dx.doi.org/10.1016 /j.jfoodeng.2011.10.029

[39] Llave, Y.A., Hagiwara, T. and Sakiyama, T. (2012) Artificial Neural Network Model for Prediction of Cold Spot Tem- perature in Retort Sterilization of Starch-Based Foods. *Journal of Food Engineering*, **109**, 553-560. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2011.10.024

[40] Fan, F.H., Ma, Q., Ge, J., Peng, Q.Y., William, W. and Riley, T.S.Z. (2013) Prediction of Texture Characteristics from Extrusion Food Surface Images Using a Computer Vision System and Artificial Neural Networks. *Journal of Food Engineering*, **118**, 426-433. http://dx.doi.org/10.1016/ j.jfoodeng.2013.04.015

[41] Sablani, S.S. and ShafiurRahman, M. (2003) Using Neural Networks to Predict Thermal Conductivity of Food as a Function of Moisture Content, Temperature and Apparent Porosity. *Food Research International*, **36**, 617-623. http://dx.doi.org/10.1016/S0963-9969(03)00012-7

[42] Liu, X., Chen, X., Wu, W. and Peng, G. (2007) A Neural Network for Predicting Moisture Content of Grain Drying Process Using Genetic Algorithm. *Food Control*, **18**, 928-933. http://dx.doi.org/10.1016/j.foodcont.2006.05.010

[43] Bahramparvar, M. (2013) Predicting Total Acceptance of Ice Cream Using Artificial Neural Network. *Journal of Food Processing and Preservation*, **38**, 1080-1088.

[44] Zheng, C., Sun, D.W. and Zheng, L. (2007) Predicting Shrinkage of Ellipsoid Beef Joints as Affected by Water Im- mersion Cooking Using Image Analysis and Neural Network. *Journal of Food Engineering*, **79**, 1243-1249. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2006.04.010

[45] Vásquez, V. and Lescano, C. (2010) Prediction by Artificial Neural Networks of the Physicochemical Quality of Cane Molasses Vinegar by Time-Temperature Effect of Food to Flash Evaporator-Distiller. *Scientia Agropecuaria*, **1**, 63-73.

[46] Yalcin, H., Toker, O.S., Ozturk, I., Dogan, M. and Kism, O. (2012) Prediction of Fatty Acid Composition of Vegetable Oils Based on Rheological Measurements Using Nonlinear Models. *European Journal of Lipid Science and Technology*, **114**, 1217-1224. http://dx.doi.org/10.1002/ejlt.201200040

[47] Chegini, G.R., Khazaei, J., Ghobadian, B. and Goudarzi, A.M. (2008) Prediction of Process and Product Parameters in an Orange Juice Spray Dryer Using Artificial Neural Networks. *Journal of Food Engineering*, **84**, 534-543. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2007.06.007

[48] Rai, P., Majumdar, G.C., DasGupta, S. and De, S. (2005) Prediction of the Viscosity of Clarified Fruit Juice Using Ar- tificial Neural Network: A Combined Effect of Concentration and Temperature. *Journal of Food Engineering*, **68**, 527-533. http://dx.doi.org/10.1016/ j.jfoodeng.2004.07.003

[49] Higginsa Di Prestwidge, A., Stirling, D. and Yost, J. (2010) Forecasting Maturity of Green Peas: An Application of Neural Networks. *Computers and Electronics in Agriculture*, **70**, 151-156. http://dx.doi.org/10.1016/j.compag.2009.09.018

[50] Meng, X., Zhang, M. and Adhikari, B. (2012) Prediction of Storage Quality of Fresh-Cut Green Peppers Using Artifi- cial Neural Network. *International Journal of Food Science and Technology*, **47**, 1586-1592. http://dx.doi.org/10.1111/j.1365-2621.2012.03007.x

[51] Torrecilla, J.S., Otero, L. and Sanz, P.D. (2004) A Neural Network Approach for Thermal/Pressure Food Processing. *Journal of Food Engineering*, **62**, 89-95. http://dx.doi.org/10.1016/S0260-8774(03)00174-2

[52] Nourbakhsh, H., Emam-Djomeh, Z., Omid, M., Mirsaeedghazi, H. and Moini, S. (2014) Prediction of Red Plum Juice Permeate Flux during Membrane Processing

with ANN Optimized Using RSM. *Computers and Electronics in Agriculture*, **102**, 1-9. http://dx.doi.org/10.1016/ j.compag.2013.12.017

[53] Mateo, F., Gadea-Gironés, R., Mateo, E.M. and Jiménez, M. (2011) Multilayer Perceptron Neural Networks and Radi- al-Basis Function Networks as Tools to Forecast Accumulation of Deoxynivalenol in Barley Seeds Contaminated with *Fusarium culmorum*. *Food Control*, **22**, 88-95. http://dx.doi.org/10.1016/ j.foodcont.2010.05.013

[54] Adhikari, B. and Jindal, V.K. (2000) Artificial Neural Networks: A New Tool for Prediction of Pressure Drops of Non- Newtonian Fluid Foods through Tubes. *Journal of Food Engineering*, **46**, 43-51.

[55] Razmi-Rad, E., Ghanbarzadeh, B., Mousavi, S.M., Emam-Djomeh, Z. and Khazae, J. (2007) Prediction of Rheological Properties of Iranian Bread Dough from Chemical Composition of Wheat Flour by Using Artificial Neural Networks. *Journal of Food Engineering*, **81**, 728-734. http://dx.doi.org/10.1016/ j.jfoodeng.2007.01.009

[56] Abbasi, H., Mahdi, S., Ardabili, S., Emam-djomeh, Z., Mohammadifar, M., Zekri, M. and Aghagholizadeh, A. (2012) Prediction of Extensograph Properties of Wheat-Flour Dough: Artificial Neural Networks and a Genetic Algorithm Approach. *Journal of Texture Studies*, **43**, 326-337. http://dx.doi.org/10.1111/j.1745-4603.2011.00342.x

[57] Curvelo, J.C., Dias, G., Rrodrigues de souza, R. and Tambourgi, E. (2010) Applying of Neural Network on the Wine Sensorial Analysis from Barbados Cherry. *Journal of Food Process Engineering*, **33**, 365-378. http://dx.doi.org/10.1111/j.1745-4530.2009.00521.x

[58] Rojas Naccha, J. and Vásquez Villalobos, V. (2012) Prediction by Artificial Neural Networks (ANN) of the Diffusivity, Mass, Moisture, Volume and Solids on Osmotically Dehydrated Yacon (*Smallantus sonchifolius*). *Scientia Agropecuaria*, **3**, 201-214.

[59] Nakano, K., Kurata, K. and Kaneko, M. (1991) Effects of Alcohol Treatment on Banana Ripening and Application of Image Processing to Colour Grade Measuring. *Journal Society Agriculture Structure*, **21**, 203-208.

[60] Nakano, K. (1997) Application of Neural Networks to the Color Grading of Apples. *Computers and Electronics in Agriculture*, **18**, 105-116. http://dx.doi.org/10.1016/S0168-1699(97)00023-9

[61] Millán, F. and Gil, L. (2011) Design and Optimization of an Artificial Neural Network for Modeling Syrup Production Process from Defatted Corn Germ. *Annals of the Metropolitan University*, **11**, 177-190.

[62] Torrecilla, J.S., Otero, L. and Sanz, P.D. (2005) Artificial Neural Networks: A Promising Tool to Design and Optimize High-Pressure Food Processes. *Journal of Food Engineering*, **69**, 299-306. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2004.08.020

[63] Torrecilla, J.S., Otero, L. and Sanz, P.D. (2007) Optimization of an Artificial Neural Network for Thermal/Pressure Food Processing: Evaluation of Training Algorithms. *Computers and Electronics in Agriculture*, **56**, 101-110. http://dx.doi.org/10.1016/j.compag.2007.01.005

[64] Hernández, J.A. (2009) Optimum Operating Conditions for Heat and Mass Transfer in Foodstuffs Drying by Means of Neural Network Inverse. *Food Control*, **20**, 435-438. http://dx.doi.org/10.1016/j.foodcont.2008.07.005

[65] Morimoto, T., De Baerdemaeker, J. and Hashimoto, Y. (1997) Optimization of Heat Treatment for Fruit during Storage Using Neural Networks and Genetic Algorithms. *Computers and Electronics in Agriculture*, **19**, 87-101. http://dx.doi.org/10.1016/S0168-1699(97)00037-9

[66] Morimoto, T., De Baerdemaeker, J. and Hashimoto, Y. (1997) An Intelligent Approach for Optimal Control of Fruit- Storage Process Using Neural Networks and Genetic Algorithms. *Computers and Electronics in Agriculture*, **18**, 205- 224. http://dx.doi.org/10.1016/S0168-1699(97)00030-6

[67] Balasubramania, S., Panigrahi, S., Loguec, C.M., Gub, H. and Marchello, M. (2009) Neural Networks-Integrated Metal Oxide-Based Artificial Olfactory System for Meat Spoilage Identification. *Journal of Food Engineering*, **91**, 91-98. http://dx.doi.org/ 10.1016/j.jfoodeng.2008.08.008

[68] Peres, A.M., Baptista, P., Malheiro, R., Dias, L.G., Bento, A. and Pereira, J.A. (2011) Chemometric Classification of Several Olive Cultivars from Trás-os-Montes Region (Northeast of Portugal) Using Artificial Neural Networks. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **105**, 65-73. http://dx.doi.org/10.1016/j.chemolab.2010.11.001

[69] Furferi, R., Carfagni, M. and Daou, M. (2008) Real-Time Estimation of Olive Oil Quality Parameters: A Combined Approach Based on ANNs and Machine Vision. New Aspects of Computers Part: II. *Proceedings of the* 12*th WSEAS International Conference on Computers*, Iraklion, 23-25 July 2008, 387-392.

[70] Ram, T., Wiesman, Z., Parmet, I. and Edan, Y. (2010) Olive Oil Content Prediction Models Based on Image Proces- sing. *Biosystems Engineering*, **105**, 221-232. http://dx.doi.org/10.1016/j.biosystemseng.2009.10.011

[71] García-González, D.L., Luna, G., Morales, M.T. and Aparicio, R. (2009) Stepwise Geographical Traceability of Virgin Olive Oils by Chemical Profiles Using Artificial Neural Network Models. *European Journal of Lipid Science and Technology*, **111**, 1003-1013. http://dx.doi.org/10.1002/ejlt.200900015

[72] Torrecilla, J.S., Cancilla, J., Matute, G. and Díaz Rodríguez, P. (2013) Neural Network Models to Classify Olive Oils within the Protected Denomination of Origin Framework. *International Journal of Food Science and Technology*, **48**, 2528-2534. http://dx.doi.org/10.1111/ijfs.12245

[73] Marini, F., Magrí, A.L., Bucci, R. and Magrí, A.D. (2007) Use of Different Artificial Neural Networks to Resolve Bi- nary Blends of Monocultivar Italian Olive Oils. *Analytica Chimica Acta*, **599**, 232-240. http://dx.doi.org/10.1016/j.aca.2007.08.006

[74] Zupan, J., Novic, M., Li, X. and Gasteiger, J. (1994) Classification of Multicomponent Analytical Data of Olive Oils Using Different Neural Networks. *Analytica Chimica Acta*, **292**, 219-234.http://dx.doi.org/10.1016/0003-2670(94)00085-9

[75] Furferi, R., Carfagni, M. and Daou, M. (2007) Artificial Neural Network Software for Real Time Estimation of Olive Oil Qualitative Parameters during Continuous Extraction. *Computers and Electronics in Agriculture*, **55**, 115-131. http://dx.doi.org/10.1016/j.compag.2006.12.006

[76] Furferi, R., Carfagni, M. and Daou, M. (2008) Real-Time Estimation of Peroxides and Acidity Level of Extra-Virgin Olive Oil: An Integrated Approach. *International Journal of Mathematics and Computers in Simulation*, **2**, 206-214.

[77] Torrecilla, J.S., Mena, M.L., Yáñez-Sedeño, P. and García, J. (2007) Application of Artificial Neural Network to the Determination of Phenolic Compounds in Olive Oil Mill Wastewater. *Journal of Food Engineering*, **81**, 544-552. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2006.12.003

[78] Torrecilla, J.S., Mena, M.L., Yáñez-Sedeño, P. and García, J. (2008) Field Determination of Phenolic Compounds in Olive Oil Mill Wastewater by Artificial Neural Network. *Biochemical Engineering Journal*, **38**, 171-179. http://dx.doi.org/10.1016/j.bej.2007.06.013

[79] Bordons, C. and Cueli, J. (2004) Predictive Controller with Estimation of Measurable Disturbances. Application to an Olive Oil Mill. *Journal of Process Control*, **14**, 305-315. http://dx.doi.org/10.1016/S0959-1524(03)00043-X

[80] Jiménez, A., Beltrán, G., Aguilera, M.P. and Uceda, M. (2008) A Sensor-Software Based on Artificial Neural Network for the Optimization of the Olive Oil Elaboration Process. *Sensors and Actuators B*: *Chemical*, **129**, 985-990. http://dx.doi.org/10.1016/j.snb.2007.09.030

Capítulo 3.2. Resultados

Predicción de las características potenciales de la masa de aceituna

Y. Allouche *et al.*, *J. Near Infrared Spectrosc.* **23**, 111–121 (2015)
Received: 17 March 2015 ■ Revised: 19 May 2015 ■ Accepted: 20 May 2015 ■ Publication: 9 June 2015

JNIRS JOURNAL OF NEAR INFRARED SPECTROSCOPY

Near infrared spectroscopy and artificial neural network to characterise olive fruit and oil online for process optimisation

Yosra Allouche,* Estrella Funes López, Gabriel Beltrán Maza and Antonio Jiménez Márquez
IFAPA Centro "Venta del Llano," Junta de Andalucía, PO Box 50, Mengíbar, Jaén E-23620, Spain. E-mail: yosra80@msn.com

Abstract

Un sensor-software basado en una red neuronal artificial (SS-ANN) fue diseñado para la caracterización en tiempo real de la aceituna (relación pulpa/ hueso, índice extractabilidad, humedad y contenido de aceite) y las características del aceite extraído (acidez libre, índice de peróxidos, K_{232} y K_{270}, pigmentos y polifenoles) a partir de la masa de aceituna antes del batido. Estas predicciones se logra midiendo variables relacionadas con la aceituna en la molienda, incluyendo el tipo de molino de martillos (criba simple, doble criba y Listello), diámetro criba (4 mm, 5 mm, 6 mm y 7 mm), velocidad de rotación de los martillos (2000 rpm a 3000 rpm), temperatura de la aceituna antes de la molienda y temperatura ambiente de la almazara. Estos datos conformaban los inputs junto con los espectros (NIR) de la masa de aceituna recién molida capturados de forma online en la batidora, con dos pretratamientos 'moving average' o 'transformada wavelet'. Las redes mostraron una buena capacidad predictiva para todos los parámetros analizados. Considerando el error cuadrático medio de predicción (RMSEP), la desviación predictivo residual (RPD) y el coeficiente de determinación de validación (r^2), los modelos pretratados con la 'transformada wavelet' fueron más precisos que los pretratados con 'moving average'. Como ejemplos, para la humedad y polifenoles, los valores de RMSEP fueron de 1.79% y 87.80 $mgkg^{-1}$, y 1.46% y 61.50 $mgkg^{-1}$, para 'moving average' y para la 'transformada wavelet',

respectivamente. Se encontraron resultados similares para el resto de parámetros. En conclusión, estos resultados confirman la viabilidad del sensor-software (SS-ANN) como una herramienta para optimizar el proceso de elaboración del aceite de oliva a través de las características potenciales de la aceituna.

Keywords: aceituna, aceite de oliva, proceso de optimización, control en línea, el sensor-software, redes neuronales artificiales

1. Introducción

El aceite de oliva virgen es considerado la fuente de grasa más importante en la dieta mediterránea, y es muy apreciado por los consumidores, debido a sus propiedades organolépticas únicas y numerosos beneficios para la salud. [1,2]

El aceite es obtenido del fruto del olivo (Olea euroapaea L.) utilizando únicamente procedimientos mecánicos y sin el uso de cualquier tratamiento químico. La calidad del aceite de oliva virgen depende de muchos factores tales como las técnicas agronómicas, las condiciones agroclimáticas, la etapa de maduración y la recolección de la aceituna. Otros factores relacionados con la calidad del aceite de oliva son el transporte y recepción del fruto, preparación de la masa de aceituna (molienda del fruto y batido de la masa), la separación de la fase oleosa, almacenamiento y envasado del aceite de oliva. Suponiendo que la aceituna llega en condiciones óptimas a la almazara, la continua regulación y optimización de las fases de extracción son necesarias para asegurar la producción de un producto de alta calidad.[3] Dado el gran número de variables que afectan al producto final, y la dificultad en optimizar el ajuste de las mismas debido a la relación existente entre ellas, muchas almazaras todavía están siendo controladas manualmente por los maestros de almazara que supervisan de forma sencilla de las principales variables a través de los sensores instalados. Una pérdida de rendimiento y el mínimo control sobre la calidad del producto final son el resultado del proceso de extracción. Una efectiva optimización del proceso de extracción del aceite de oliva requiere un conocimiento en tiempo real de las características de la aceituna y del aceite de oliva virgen obtenido, así como las pérdidas en los subproductos (orujo).[4] En lo que se refiere a las aceitunas, la información anticipada sobre la humedad y el

contenido de aceite es considerado lo más importante, ya que permite el pago a los productores y la regulación de las variables del proceso tales como las condiciones de batido, la adición de agua y la posición del punto de salida del aceite en el decantador centrífugo horizontal. El conocimiento de las características del aceite de oliva en términos de parámetros regulados de calidad (acidez, índice de peróxidos y dienos conjugados) y la composición (polifenoles y pigmentos, entre otros) permite la clasificación y separación de los aceites antes de su almacenamiento, y el control de las variables de operación para mejorar de calidad y para la obtención de aceites "singulares". Los métodos analíticos convencionales utilizados en la industria del aceite de oliva para determinar estos parámetros se basan en la medición física / química en laboratorios. Estos métodos son tediosos, fuera de línea, destructivos y requieren mucho tiempo, y no proporcionan información rápida para el rápido ajuste de las variables del proceso de extracción. Por lo tanto, hay una necesidad de un método de análisis rápido para determinar estos parámetros de forma simultánea.

La espectroscopia de infrarrojo cercano (NIR) como método multiparamétrico, potencialmente adecuado, no destructivo y rápido es una de las técnicas online más comunes utilizadas en la industria del aceite de oliva en los últimos años.[5] En combinación con herramientas quimiométricas, se obtuvo la viabilidad de una técnica NIR online para medir el contenido de aceite y humedad del orujo del decanter de dos fases.[6] Otros estudios han descrito el uso de sensores NIR para la caracterización online de aceites de oliva virgen determinando pigmentos (carotenos y clorofilas),[7] y el valor de la acidez, el amargor y la composición de ácidos grasos.[8] Por otro lado, parece factible el uso de un sensor de Filtro Acústico-Óptimo Sintonizable de Infrarrojo Cercano (AOTF-NIR) combinado con una red neuronal artificial (ANN) para predecir el contenido de humedad y grasa en orujo de oliva durante el proceso de extracción en línea.[9]

En vista de estos resultados prometedores, el objetivo de este trabajo fue investigar la capacidad de un sensor-software basado en redes neurales artificiales (SS-ANN), operando online, para predecir los parámetros de la aceituna (relación pulpa/hueso, índice de extractabilidad, humedad y contenido de aceite) y las características potenciales de la masa de aceituna antes de ser batida, a través de los principales parámetros químicos del aceite de oliva virgen extraído (acidez libre, índice de peróxido, K_{232} y K_{270}, pigmentos y polifenoles). Estas predicciones se obtuvieron

utilizando, como inputs, las mediciones de las variables tecnológicas relacionadas con la aceituna durante la molienda y la información espectral NIR obtenida online sobre la masa de aceituna recién molida antes del batido. Además, y debido a que el pretratamiento de datos espectrales se considera un paso indispensable para el análisis),[10] se realizaron dos técnicas de suavizado, 'moving average' y 'transformada wavelet', para comparar la capacidad predictiva de las redes neuronales de acuerdo con el pretratamiento empelado.

2. Material y métodos

2.1. *Muestras de aceitunas*

Se recogieron muestras de aceituna a lo largo de la campaña de recolección entre los meses de noviembre a enero y durante cuatro cosechas consecutivas. Una vez recolectadas, las aceitunas fueron transportadas directamente a la almazara experimental del IFAPA "Venta del Llano" donde fueron procesadas. Inmediatamente antes de la molienda y para cada lote de aceituna (aproximadamente 1000 kg), se tomaron muestras de aceituna (unos 2 kg) y llevadas al laboratorio para su análisis y extracción de aceite.

2.2. *Condiciones de procesamiento y extracción*

La almazara experimental del IFAPA es un sistema continuo de dos fases que consiste básicamente en un molino de martillos Pieralisi (HP50), con cribas móviles de diferentes diámetros y una velocidad de rotación regulada, una batidora de tres cuerpos horizontales con una capacidad de 500 kg en cada cuerpo (Pieralisi, España), un decantador centrífugo horizontal líquido/sólido con una capacidad de 45.000 kg día^{-1} (Pieralisi SC-90) y una centrífuga vertical para limpieza de aceite (Pieralisi P1500). El proceso fue controlado y supervisado utilizando software de automatización Procioleo (Procisa, Sevilla, España). En este trabajo, se utilizaron tres tipos de molinos de martillos (criba simple, doble criba y Listello), con cuatro diámetros de criba diferentes (4 mm, 5 mm, 6 mm y 7 mm) a distintas velocidades de rotación de los martillos (2000 rpm a 3000 rpm).

A fin de determinar las características potenciales de aceite de oliva virgen de cada lote, las muestras de aceitunas recogidas fueron procesadas mediante una almazara a escala de laboratorio, conocido por sistema Abencor (Abengoa, Sevilla, España).[11] El mosto

oleoso extraído se dejó por decantar para posteriormente ser filtrado. Los aceites obtenidos fueron almacenados a -20 ° C hasta su análisis.

2.3. *Determinaciones analíticas*

Aceituna

Las muestras de aceituna se analizaron por triplicado en el laboratorio, por medio de métodos de análisis correspondientes, justamente después de haber sido tomadas en la almazara experimental. Se determinó la relación pulpa / hueso, el contenido de humedad y el índice de extractabilidad. Para medir la relación pulpa/hueso, se recogieron 100 aceitunas de cada lote.[12] El contenido de humedad, expresado en porcentaje, se analizó mediante el secado de las aceitunas trituradas en una estufa de aire forzado a 105°C hasta conseguir un peso constante.[13] El contenido de aceite se determinó mediante un analizador de grasa por resonancia magnética nuclear (RMN) mq 10NMR (Bruker, Madrid, España) El índice de extractabilidad (EI) expresado en porcentaje referido sobre peso fresco. se calculó como describió Beltrán *et al.*[12] utilizando la fórmula:

$$EI = \frac{Vxd}{WxF} x100$$

donde V (ml) es el volumen de aceite de oliva extraído; d = 0.915 g ml^{-1} es la densidad media del aceite de oliva; W (g) es el peso de masa de aceituna y F (%) es el contenido de aceite en aceituna fresca medida por el analizador RMN.

Aceite de oliva

Los parámetros de calidad fisicoquímicos regulados (acidez libre, índice de peróxidos y absorción UV a 232 nm y a 270 nm (K_{232} y K_{270})) se determinaron de acuerdo con los métodos analíticos descritos en el Reglamento 1348/2013 de la UE de Unión Europea Comisión.[14]

La acidez libre se expresó como el porcentaje de ácido oleico, el índice de peróxidos como miliequivalentes de oxígeno activo por kg de aceite (mEq O2 kg^{-1}), y los coeficientes de extinción K_{232} y K_{270} se calcularon a partir de la absorción a 232 nm y 270 nm, respectivamente, siendo éstos adimensionales.

La determinación del contenido de polifenoles se llevó a cabo de acuerdo con el método descrito por Vázquez-Roncero *et al.*[15] utilizando el reactivo de Folin-Ciocalteu y la

medición de la absorbancia a 725 nm. Los resultados se expresaron como mg kg^{-1} de ácido caféico.

El contenido de pigmentos, carotenoides y clorofilas, expresado en $mgkg^{-1}$ de aceite, se determinaron midiendo la absorbancia a 470 nm y 670 nm, respectivamente.[16]

Todas las determinaciones se realizaron por triplicado, y las mediciones de absorbancia se realizaron en un espectrofotómetro UV-Vis (Varian Cary 50 Bio; http://www.chem.agilent.com/chem).

2.4. *Instrumentación NIR*

Los espectros de absorbancia se obtuvieron utilizando un equipo con un filtro acústico-óptico sintonizable de infrarrojo cercano (AOTF-NIR) (Brimrose Corp., Baltimore, MD) a través de un sensor para la medición de la reflectancia colocado en una ventana de zafiro a la mitad del primer cuerpo de la batidora, donde fue recibida la masa de aceitunas recién trituradas (Fig. 1). Este sensor se conecta al equipo AOTF-NIR por un cable de fibra óptica de 11m.

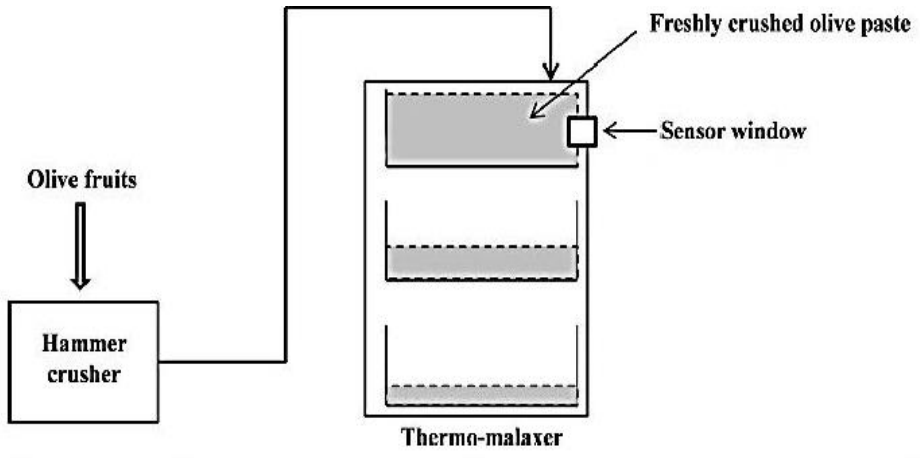


Figura.1. Diagrama esquemático de la localización del sensor AOTF-NIR en el primer cuerpo de la termobatidora en la almazara.

Este equipo permite el escaneado instantáneo de la masa de aceituna a través del sensor y fue programado para grabar tres espectros de cada muestra de masa de aceituna a una velocidad de 10 $barridoss^{-1}$, en el intervalo de 1100 a 2500 nm con una resolución de 2 nm. La Figura 2 ilustra los espectros AOTF-NIR de la masa de aceituna.

2.5. *Pretratamiento espectral*

En primer lugar, los espectros se redujeron al rango útil entre 1100 nm y 2150 nm para posteriormente ser sometidos a un análisis de componentes principales (PCA) para eliminar espectros anómalos utilizando la función de Hotelling-T^2 (Unscrambler 9,7, Camo, Oslo, Noruega). Los datos espectrales que quedaron, fueron tratados previamente por los dos procedimientos de suavizado. El primer tratamiento fue 'moving average' (factor 6) (usando Unscrambler 9,7,) y el segundo 'transformada wavelet' en el nivel 4 "Daubechies D4" [*Matlab 7.10.0.499 (R2010a); The Math Works, Natick, MA*][9]. Posteriormente, a ambos se les aplicó la primera derivada "Savitzky-Golay" (tres puntos de suavizado), obteniéndose finalmente 88 y 39 puntos espectrales, respectivamente.

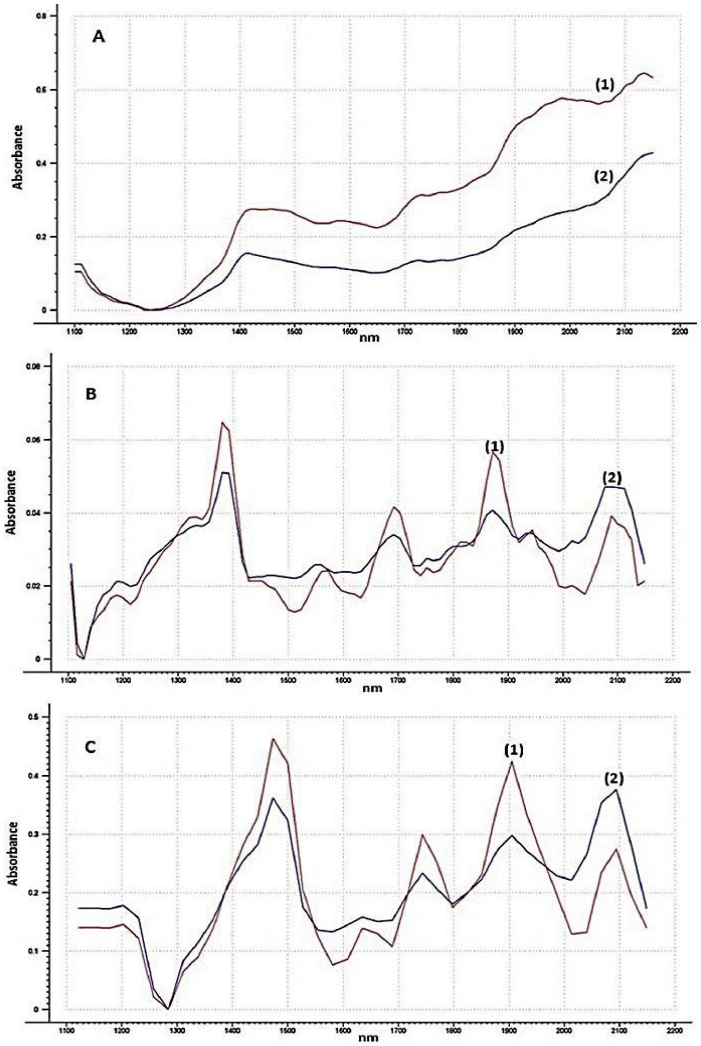


Figura 2. Espectros AOTF- NIR de la masa de aceituna recién molida en el primer cuerpo de la batidora con (1) humedad alta (59,06%) y (2) baja humedad (45,07%). (A) los espectros originales. (B) espectros con moving average y 1ª derivada. (C) espectros con la transformada wavelet y la 1ª derivada.

2.6. *ANN*

El tipo de ANN utilizado en este trabajo fue ‘back-propagación perceptrón’ con aprendizaje supervisado. Se caracteriza por una arquitectura de capas, con conexiones ‘feed-forward’, de alimentación directa entre las neuronas o conexiones hacia atrás.

La ANN fue diseñada con el software Matlab usando la función " Newff". Para obtener modelos adecuados, se probó con diferentes combinaciones cambiando siguientes características de las redes: el número de capas ocultas (de 1 a 3), el número de neuronas en cada capa (de 5 a 90), la función de transferencia entre las capas ("tansig", "logsig", "purelin"), los algoritmos de entrenamiento ("trainrp", "traingdx", "trainscg", "traingda") y el número de iteraciones, el cual se optimizó a 1000 cuando la media error cuadrático fue inferior a 0,001.

Para el desarrollo de la ANN, primero, se normalizó el conjunto de datos (inputs y outputs) al rango [-1 1] por la función de Matlab "MinMax" y posteriormente se dividió en tres subgrupos. Los primeros y terceros subconjuntos se emplearon para el entrenamiento y simulación, y el segundo subconjunto fue para la validación.

Los inputs de las redes los conformaban los datos espectrales pretratados como se describe anteriormente, variables tecnológicas del molino de martillos, el diámetro de criba y la velocidad de rotación del martillo, la temperatura de la aceituna antes de ser molida y la temperatura ambiente de la almazara. La Tabla 1 muestra el rango de valores para cada una de estas variables de entrada.

Tabla 1. Rangos de las variables de entrada utilizadas para la construcción de las redes.

Input variables	
Olive fruit temperature (ºC)	2.5-19.4
Room temperature (ºC)	4.3-20.7
Hammer velocity (rpm)	2000-3000
Sieve diameter (mm)	4-5-6-7
Type of hammer crusher	Single grid-Double grid-Listello

n= 210

Para el tipo de molino de martillo, se asignaron los valores discretos 1, 2 y 3, para criba simple, Listello y doble criba, respectivamente y los valores 4, 5, 6 y 7 para los diámetros de criba.

En este estudio, los outputs deseados fueron tratados individualmente, por lo que se crearon 11 redes neuronales para cada pretratamiento espectral. Cuatro de estas redes correspondieron a la predicción de las características de la aceituna (la relación pulpa / hueso, el contenido de humedad, el contenido de aceite y EI) y el resto a la predicción de las características del aceite de oliva (acidez libre, índice de peróxidos, K_{232} y K_{270}, contenido de polifenoles y de pigmentos (clorofilas y carotenoides).

Para la aceptación de modelos de ANN en la etapa de validación, se utilizó el criterio del mínimo de la raíz medio del error cuadrático de predicción (RMSE) y el máximo coeficiente de determinación de validación (r^2) entre los valores reales y los valores predichos: $RMSEP = \sqrt{\sum \frac{(y_{SS-ANN} - y_r)^2}{n-1}}$ donde y_{SS-ANN} es el valor predicho; y_r es el valor real; y n es el número de muestras en el conjunto de datos.

Además, como indicador de la calidad de los modelos se calculó el parámetro de RPD (desviación de predicción residual) que representa la relación entre la RMSEP y la desviación estándar (SD) de los datos de referencia. Valores de RPD superiores a 3 indican una calibración adecuada para el objetivo de control la calidad.[17]

3. Resultados y discusión

En este trabajo, las ANN fueron construidas para predecir las características de la aceituna a procesar (contenido de humedad, aceite, relación pulpa / hueso y extractabilidad) y el aceite de oliva obtenido (índices calidad, polifenoles y pigmentos). Las estadísticas descriptivas obtenidas para estos parámetros de análisis de referencia mostraron gran variabilidad, sin duda debido a la naturaleza cambiante de la aceituna durante las cuatro campañas. En las Tablas 2 y 3, se muestra el valor medio y el rango de cada parámetro.

Tabla 2. Rangos y valores medios de los parámetros de la aceituna obtenidos por los métodos de laboratorio de referencia.

Olive fruit parameters	Mean ± S.D.	Minimum-Maximum
Extractability index (%)*	0.67 ± 0.09	0.35-1.01
Oil content on FW (%)***	22.46 ± 2.76	15.26-30.87
Olive fruit moisture (%)***	51.19 ± 5.13	41.14-64.14
Pulp/stone ratio**	4.29 ± 1.35	1.78-6.52

*n= 210; ** n=267; ***n = 630. S.D. Standard deviation

FW: fresh weight

Tabla 3. Rangos y valores medios de los parámetros de aceite de oliva obtenidos por métodos de laboratorio de referencia.

Olive oil parameters	Mean ± S.D.	Minimum-Maximum
Free Acidity (% of oleic acid)	0.44 ± 0.44	0.12-2.92
Peroxide values (mEq O_2/kg)	4.24 ± 2.05	1.42-10.7
UV absorption at 232 nm (K_{232})	1.59 ± 0.16	1.3-2.18
UV absorption at 270 nm (K_{270})	0.15 ± 0.03	0.08-0.23
Carotenoid content (mg/kg)	7.0 ± 2.2	3.0-14.9
Chlorophyll content (mg/kg)	6.6 ± 3.4	1.5-21.0
Polyphenol content (mg/kg)	488 ± 197	130-1228

n= 210. S.D. Standard deviation

3.1. *Modelos de ANN para las características de la aceituna*

Las topologías óptimas de las redes encontradas para las características de la aceituna fueron detalladas en la Tabla 4. Como se muestra en dicha tabla, para ambos pretratamientos de datos espectrales (moving average y transformada wavelet), se utilizó la función de entrenamiento "trainrp", basada en la actualización de los valores de los pesos y sesgos de acuerdo con el algoritmo ‘back reslient’, siendo ésta función la que mejor entrenamiento para todos los parámetros estudiados obteniendo valores de entrenamiento de R^2 valores superiores a 0.995.

En general, para casi todos los parámetros estudiados y para ambos pretratamientos, se consiguieron como tipologías óptimas, dos capas ocultas con diferente pero similar

número del total neuronas y una función de transferencia sigmoide entre diferentes capas ("tansig" y / o "logsig"), a excepción de la humedad y del IE, las cuales necesitaron tres capas ocultas con el mayor número de neuronas para la construcción de las redes usando el pretratamiento ‘average móvil’. Por otra parte, hay que señalar que la función sigmoide "tansig" se aplicó a la capa de salida en todos los casos menos uno. La excepción se encontró para el caso de la ANN del contenido graso de aceituna con el pretratamiento ‘movin average’, que utiliza la función lineal "purelin" en la capa de salida.

La capacidad predictiva de cada modelo generado se validó usando datos de una serie de muestras que fueron excluidos de la etapa de entrenamiento. Como se muestra en la Tabla 4, los resultados más precisos, con mayores valores de los coeficientes de determinación (R^2) y RPD y un menor error de predicción (RMSEP) se lograron, mediante el pretratamiento wavelet en comparación con el moving average para todos los parámetros estudiados de la aceituna.

Tabla 4. Topologías óptimas de ANN obtenidas para la predicción de las características de la aceituna.

	Moving Average						Wavelet transform					
	ANN Topology		Training	Validation			ANN Topology		Training	Validation		
Olive fruit parameters	Neurons	Transfer f.	R^2	r^2	RMSEP	RPD	Neurons	Transfer F.	R^2	r^2	RMSEP	RPD
Extractability index (%)	66/78/84/1	tan/log/tan/tan	0.999	0.655	0.05	1.61	29/32/1	tan/tan/tan	0.998	0.807	0.04	2.23
Oil content on FW (%)	35/23/1	tan/log/prl	1.000	0.759	1.43	1.94	24/38/1	tan/log/tan	0.995	0.846	1.11	2.48
Olive moisture (%)	66/72/80/1	tan/log/log/tan	0.999	0.882	1.79	2.86	30/40/1	tan/tan/tan	0.998	0.922	1.46	3.51
Pulp/stone ratio	36/34/1	tan/log/tan	0.999	0.928	0.36	3.70	29/40/1	tan/log/tan	0.999	0.952	0.31	4.41

Training function was 'trainrp' for all parameters
Tranfer f. means transfer function: tan: tansig; log: logsig; prl: purelin
R^2: *coefficient of determination of training*; r^2: coefficient of determination of validation; RMSEP: root mean square error of prediction; RPD: residual predictive deviation
FW: fresh weight

Por otra parte, los modelos obtenidos para la humedad de la aceituna y la relación pulpa /hueso mostraron una muy buena predicción, ya que los valores RPD fueron superiores

a 3.5.[17] En el caso de la IE y el contenido de aceite, aunque los valores RPD fueron inferiores a 3, los resultados pueden considerarse razonables y posiblemente adecuados para la detección o monitorización, ya que los valores del rango del ratio de error de (RER) fueron superiores a 12, el mínimo recomendado para el control de calidad[17] (16.50 y 14.06, respectivamente, para el IE y el contenido de aceite).

En la Figura 3, se mostraron los resultados de la predicción de los SS-ANN utilizando el pretratamiento wavelet; considerando que las pendientes están cerca de 1 en todos los casos.

Hasta la fecha, se tiene constancia de la una escasez de trabajos relativos a la predicción on-line de las características de la aceituna. Por lo tanto, los resultados obtenidos sólo pueden ser comparados con los conseguidos por otros autores utilizando instrumentos NIR en el laboratorio de forma off-line.

Sin embargo, las comparaciones directas no son relevantes, ya que los errores de muestreo son diferentes en ambos tipos de análisis. Esto puede explicarse, ya que los conjuntos de muestras de masa de aceitunas son más grandes, y por lo tanto el error de muestreo, probablemente es muy superior en mediciones dinámicas online.

Por otra parte, y dado que no hay ningún estudio hasta ahora sobre el análisis, ya sea online u offline de la relación pulpa / hueso y el IE, solamente la humedad y el contenido de aceite de la aceituna se discuten a continuación.

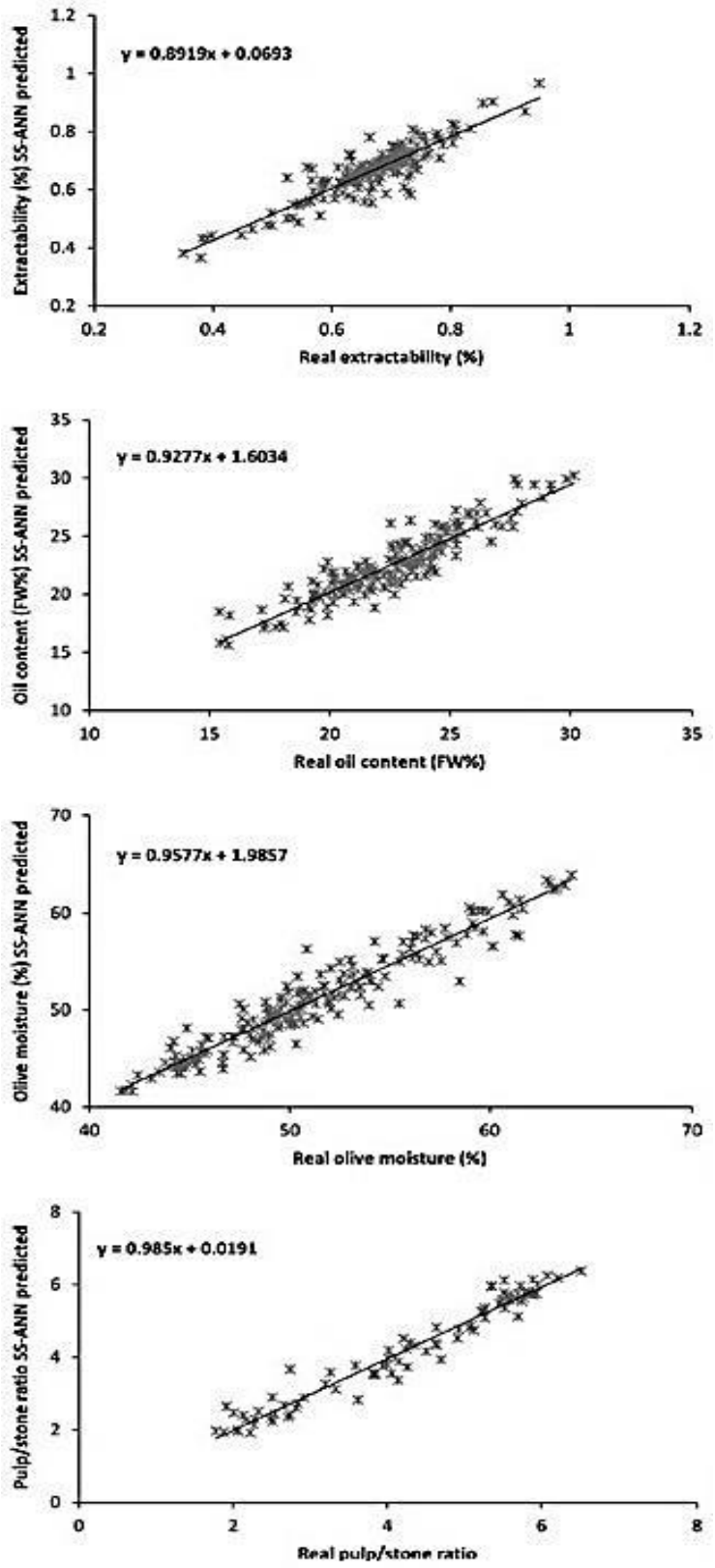


Figura. 3. Diagrama de dispersión de las características de la aceituna reales vs a las predichas por SS-ANN utilizando el pretratamiento Wavelet.

Los resultados para la humedad de la aceituna obtenidos en este estudio son muy similares a los encontrados previamente por Bendini *et al.*[18] (r^2 = 0.912). Sin embargo, Jiménez *et al.*[19] y García-Sánchez *et al*.[20] obtuvieron valores de r^2 más altos (0.988 y 0.960, respectivamente). Además, estos autores consiguieron errores de predicción más bajos, siendo 1.29% el valor más alto obtenido por Bendini *et al.*[18] Para el contenido de aceite, los mismos autores consiguieron una mayor correlación lineal entre los datos con r^2 = 0.982,[20] r^2 = 0.970[20] y r^2 = 0.922[18] y valores de RMSEP inferiores de 0.81%[19,21] y 0.67%.[18]

Además, cabe destacar que la determinación online de estos dos parámetros ha sido descrita recientemente por Salguero-Chaparro *et al*.,[22] aunque fue en aceitunas intactas. No obstante, estos autores encontraron valores bajos de r^2 de 0.870 y 0.790, para la humedad y el contenido de aceite, respectivamente. Los valores de RPD también fueron más bajos que los obtenidos en este trabajo, mientras que los valores RMSEP fueron muy superiores (RPD de 2.76 y 2.37, y RMSEP de 2.98% y 2.15% para la humedad y contenido de aceite, respectivamente).

Por el contrario, para la predicción de la humedad y contenido de aceite en aceitunas intactas en el árbol, García y Léon[23] obtuvieron valores de correlación de r^2 =0.689 y r^2 =0.723 para cada parámetro respectivamente.

3.2. *Modelos de ANN para los parámetros químicos de calidad y composición del aceite de oliva*

Las topologías de las redes óptimas encontradas para los parámetros de calidad y la composición química del aceite de oliva se enumeran en la Tabla 5. Para el caso de las características de la aceituna, la función de entrenamiento "trainrp" fue la más adecuada para todos los parámetros estudiados con R^2 de entrenamiento de valores superiores a 0.999.

Para el pretratamiento wavelet, se optó por dos capas ocultas con diferentes números de neuronas para todos los parámetros estudiados. En el caso de los peróxidos y los polifenoles en el Pretratamiento moving average se encontró la misma topología, mientras que para el resto de los parámetros se optó por tres capas ocultas.

La función sigmoide "tansig" se aplicó para la transferencia de información entre las neuronas de las capas ocultas para las redes del pretratamiento wavelet de todos los

parámetros a la excepción de los peróxidos donde ambos se utilizaron "tansig" y "logsig". Por el contrario, las funciones transferencia encontradas más adecuadas para las redes con el pretratamiento moving average fueron también "tansig" y "logsig" con la excepción de la red de los polifenoles donde se empleó solamente "tansig". Por otra parte, la función sigmoide "tansig" se aplicó de nuevo para la capa de salida, para todos los parámetros estudiados y para ambos pretratamientos.

En cuanto a la validación de modelos de los parámetros la aceituna fueron las redes con el pretratamiento wavelet las que presentaron una estimación más precisa de los datos, con un mayor coeficiente de determinación r^2, mayor valor de RPD (todos por encima de los valores 3 y calificados como adecuados para el control de calidad o de control de proceso)[17] y valores más bajos de RMSEP que los conseguidos con el pretratamiento moving average (Tab. 5).

Tabla 5. Topologías óptimas de redes obtenidas par alas características del aceite de oliva virgen.

	Moving Average						Wavelet transform					
	ANN Topology		Training	Validation			ANN Topology		Training	Validation		
Olive oil parameters	Neurons	Transfer f.	R^2	r^2	RMSEP	RPD	Neurons	Transfer F.	R^2	r^2	RMSEP	RPD
Free Acidity (% of oleic acid)	52/52/50/1	tan/log/log/tan	0.999	0.902	0.14	3.09	39/49/1	tan/tan/tan	0.999	0.948	0.11	4.07
Peroxide values (mEq O_2/kg)	42/38/1	tan/log/tan	0.999	0.879	0.73	2.82	38/38/1	tan/log/tan	0.999	0.955	0.45	4.54
UV absorption at 232 nm (K_{232})	40/54/48/1	tan/log/log/tan	0.999	0.875	0.06	2.80	30/43/1	tan/tan/tan	0.999	0.947	0.04	4.37
UV absorption at 270 nm (K_{270})	84/78/88/1	tan/log/tan/tan	1.000	0.785	0.01	2.14	20/40/1	tan/tan/tan	0.999	0.899	0.01	3.15
Carotenoid content (mg/kg)	49/51/51/1	tan/log/tan/tan	0.999	0.852	0.85	2.54	23/28/1	tan/tan/tan	0.999	0.926	0.58	3.72
Chlorophyll content (mg/kg)	35/34/47/1	tan/log/tan/tan	0.999	0.840	1.42	2.39	29/40/1	tan/tan/tan	0.999	0.917	0.96	3.54
Polyphenol content (mg/kg)	35/37/1	tan/tan/tan	0.999	0.812	87.80	2.25	28/14/1	tan/tan/tan	0.999	0.904	61.50	3.21

Training function was 'trainrp' for all parameters
Tranfer f. means transfer function: tan: tansig; log: logsig; prl: purelin
R^2: *coefficient of determination of training*; r^2: coefficient of determination of validation;; RMSEP: root mean square error of prediction; RPD: residual predictive deviation

Las Figuras 4 (A) y la Figuras 4 (B) ilustran la relación entre los valores reales y predichos SS-ANN de todos los parámetros de aceite con la técnica wavelet.

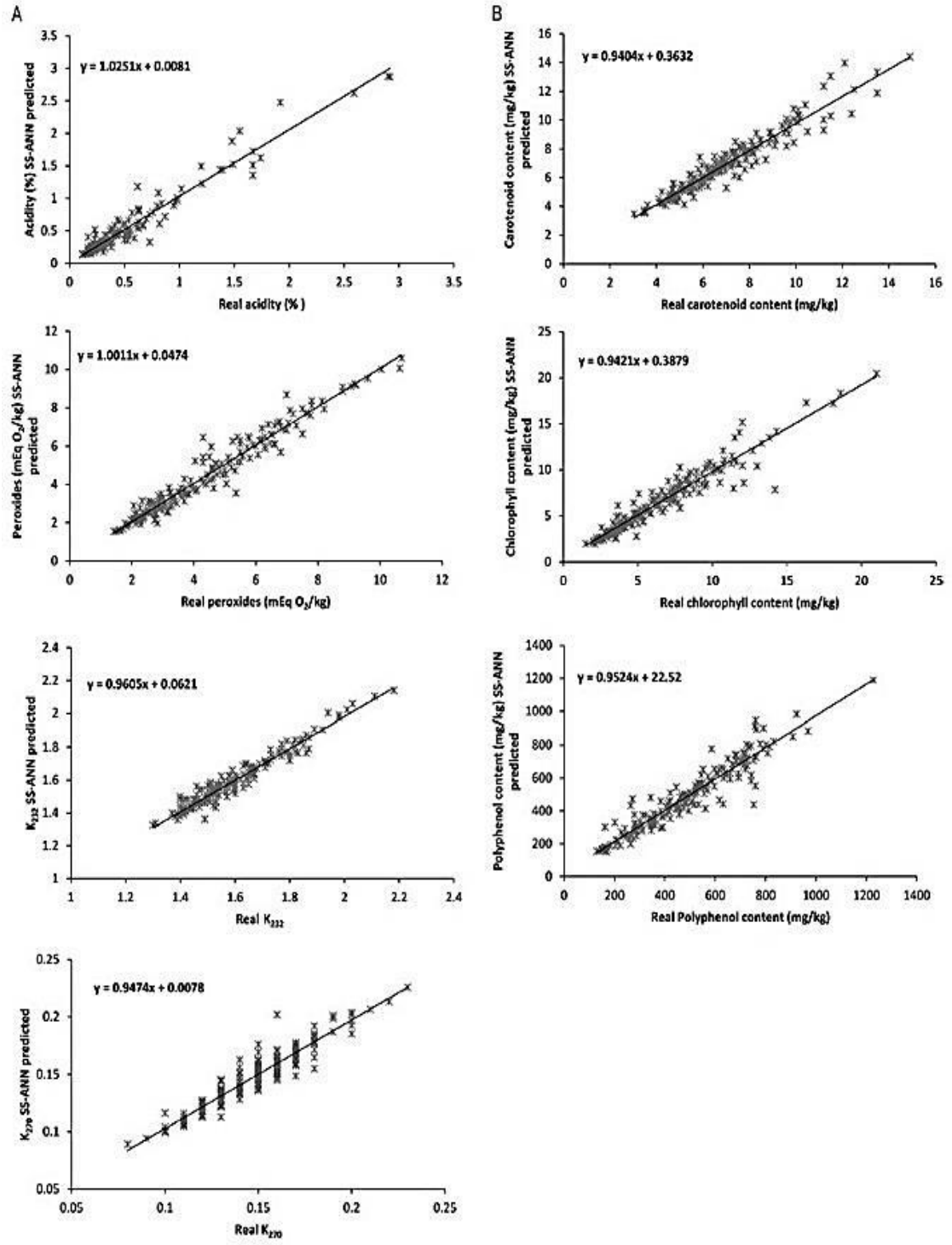


Figura 4. Diagrama de dispersión de datos reales(A) vs predichos SS-ANN de los índices de calidad del aceite de oliva con el pretratamiento wavelet. (B) Diagrama de dispersión de datos reales(A) vs predichos SS-ANN de la composición del aceite de oliva con el pretratamiento wavelet.

No ha habido ningún estudio hasta la fecha que este grupo de investigación haya encontrado que se ocupen de la predicción online de las características del aceite de oliva en la masa de aceituna en condiciones dinámicas online. En la literatura científica,

sólo hay un trabajo que describe la determinación de la acidez libre en la masa de aceituna, pero en el que se utiliza la espectrometría Raman bajo condiciones de laboratorio[24]. Por otra parte, la predicción de los parámetros químicos de calidad y composición del aceite de oliva se lleva a cabo principalmente en muestras de aceite filtrados utilizando instrumentos NIR de manera offline,[18,25-29] y sólo unos trabajos muestran la caracterización online del aceite de oliva aceite de oliva.[7,8] Por otro parte, algunos estudios han descrito la predicción de los parámetros de calidad del aceite en términos de acidez libre en las aceitunas intactas medidos offline[30,31] u online.[22] Nuevamente, estas manifestaciones indican que las comparaciones directas, en este caso, no son relevantes, y el único estudio con cualquier similitud con la de este trabajo es descrita por Muik *et al.*[24]. En dicho estudio, aunque las mediciones se realizaron con instrumentos offline, las muestras de masa de aceituna estaban en continuo movimiento (rotación) durante la adquisición de espectro con el fin de asegurar la homogeneidad de la muestra.

El coeficiente de determinación obtenido en este trabajo para la acidez libre es similar a la conseguido por Muik *et al.*[24] (r^2 = 0.955) en el rango del ácido oleico de 0.15 a 3.79% mientras que el error obtenido fue inferior (0.28%). Un RMSEP más alto (2.53%) y pero con valor de RPD menor (1.60) consiguieron Salguero-Chaparro *et al.*,[22] para un amplio rango de datos de 0.09 a 26.06%. Para los peróxidos, nuestros resultados están más cerca de los descritos por Armenta *et al.*[25] y Mailer[29] para las muestras de aceite de oliva con valores de r^2 de 0.978 y 0.920, respectivamente. El error de predicción fue menor que el obtenido por Armenta *et al.*[25] (1.87 $mEqO_2kg^{-1}$), sin embargo el indicador RPD fue mucho mayor que el encontrado por Cayuela Sánchez *et al.*[28] (2.84). Para dienos conjugados (K_{232}), estos últimos autores también encontraron valores de RPD menores (2.56), aunque los valores de r^2 no se mencionaron, lo que indica un modelo predictivo satisfactorio. Manley y Eberle[32] encontraron resultados fiables de predicción para K_{232} y K_{270} en los aceites de oliva con un diferente grado de oxidación con valores de r^2 = 0.940, RMSEP = 0.94, y r^2 = 0.870, RMSEP = 0.09, respectivamente.

En cuanto a los resultados obtenidos para las clorofilas, Jiménez[7] mostró una correlación entre los datos predichos y los reales (r^2= 0.986) más baja, aunque el valore de RMSEP fue similar 0.96 $mgkg^{-1}$. Para los carotenos, Jiménez también registró un valor de correlación r^2 mayor 0.970 con un RMSEP de 0.66 mg kg^{-1}. Por último, los resultados encontrados para polifenoles estaban más próximos a los obtenidos por

Mailer,[29] mostrando una correlación entre datos de referencia y los predichos por las redes de r^2 de 0.889.

4. Conclusiones

De los resultados obtenidos en este estudio, se puede concluir que la combinación de sensores AOTF-NIR para la monitorización en tiempo real de masa de aceituna antes del batido y las herramientas de inteligencia artificial, tales como redes neuronales es factible para la predicción online de las características de la aceituna para a procesar.

El uso de técnicas de reducción de datos que mantienen la información espectral como la wavelet, junto con las variables de proceso, permite que la construcción de modelos neuronales con capacidad predictiva suficiente para que las estrategias de proceso de optimización que se establezcan en términos de productividad y calidad del aceite de oliva, proporcionando (por adelantado) valores de referencia para establecer los valores de consigna de trabajo. Estas predicciones se realizan de forma casi instantánea, lo que hace a esta metodología indispensable para cualquier sistema de automatización de procesos, donde el objetivo es regular las diferentes variables con una mínima pérdida de tiempo y costes.

Referencias

1. S. Predieri, C. Medoro, M. Magli, E. Gatti and A. Rotondi, "Virgin olive oil sensory properties: Comparing trained panel evaluation and consumer preferences," *Food Res. Int.* **54**, 2091 (2013). doi: http://dx.doi.org/10.1016/j. foodres.2013.08.014

2. E. Waterman and B. Lockwood, "Active components and clinical applications of olive oil," *Altern. Med. Rev.* **12**, 331 (2007).

3. M. Uceda, A. Jiménez and G. Beltrán, "Olive oil extraction and quality," *Grasas Aceites* **57**, 25 (2006). doi: http://dx.doi.org/10.3989/gya.2006.v57. i1.19.

4. M. Hermoso, A. García-Ortíz, A. Jiménez, M. Uceda and J. Morales, "Automatización de almazaras. Controles experimentales para la caracterización y regulación del proceso de elaboración," INIA (CAO97-015).1997–2000.

5. S. Armenta, J. Moros, S. Garrigues and M. De La Guardia, "The use of near-infrared spectrometry in the olive oil industry," *Crit. Rev. Food Sci. Nutr.* **50**, 567 (2010). doi: http://dx.doi.org/10.1080/10408390802606790.

6. M. Hermoso, M. Uceda, A. García, A. Jiménez and G. Beltrán, "Preliminary results of NIR on-line for oil content and humidity in olive cakes from the two-phases decanter," *Acta Hortic*. **474**, 717 (1997).

7. A. Jiménez, "Monitoring carotenoid and chlorophyll pigments in virgin olive oil by visible-near infrared transmittance spectroscopy. On-line application," *J. Near Infrared Spectrosc.* **11**, 219 (2003). doi: http:// dx.doi.org/10.1255/jnirs. 368

8. A. Jiménez, A. Molina and M.I. Pascual, "Using optical NIR for on-line virgin olive oils characterization," *Sens. Actuator B-Chem.* **107**, 64 (2005). doi: http://dx.doi. org/10.1016/j.snb.2004.11.103

9. A. Jiménez, G. Beltrán, M.P. Aguilera and M. Uceda, "A sensor-software based on artificial neural network for the optimization of olive oil elaboration process," *Sens. Actuator B-Chem.* **129**, 985 (2008). doi: http://dx.doi. org/10.1016/j.snb.2007.09.030

10. P. Lash, "Spectral pre-processing for biomedical vibra- tional spectroscopy and microspectroscopic imaging," *Chemometrics Intell. Lab. Syst.* **117**, 100 (2012). doi: http:// dx.doi.org/10.1016/j.chemolab.2012.03.011

11. Y. Allouche, M. Uceda, A. Jiménez, M.P. Aguilera, J.J. Gaforio and G. Beltrán, "Fruit quality and olive leaf and Stone addition affects Picual virgin olive oil triterpenic content," *J. Agric. Food Chem.* **57**, 8998 (2009). doi: http:// dx.doi.org/10.1021/jf902105h

12. G. Beltrán, M. Uceda, A. Jiménez and M.P. Aguilera, "Olive oil extractability index as a parameter for olive cultivar characterization," *J. Sci. Food Agric*. **83**, 503 (2003). doi: http://dx.doi.org/10.1002/jsfa.1369

13. AENOR, Asociación Española de Normalización y Certificación. *Materias Grasas. Humedad y materias volátiles (método de la estufa de aire), Norma UNE 55-020- 73*, Madrid (1973).

14. "Commission Implementing Regulation (EU) No. 1348/2013 amending Regulation (EEC) No 2568/91 on the characteristics of olive oil and olive-residue oil and on the relevant methods of analysis," *Off. J. Eur. Union* **L338**, 31 (2014).

15. A. Vázquez-Roncero, C. Janer del Valle and M.L. Janer del Valle, "Determinación de polifenoles totales del aceite de oliva," *Grasas Aceites* **24**, 350 (1973).

16. M.I. Mínguez-Mosquera, L. Rejano-Navarro, B. Gandul- Rojas, A.H. Sánchez-Gómez and J. Garrido-Fernández, "Colour–pigment correlation in virgin olive oil," *J. Am. Oil Chem. Soc.* **68**, 332 (1991). doi: http://dx.doi.org/10.1007/ BF02657688

17. P. Williams *Near-Infrared Technology—Getting the Best Out of Light. a Short Course in the Practical Implementation of Near-Infrared Spectroscopy for the User*. Edn. 5.3 March 2008. PDK Projects, Nanaimo, Canada (2008).

18. A. Bendini, L. Cerratini, F. Di Virgilio, P. Belloni, G. Lercker and T. Gallina Toschi, "In-process monitoring in industrial olive mill by means of FT-NIR," *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **109**, 498 (2007). doi: http://dx.doi.org/10.1002/ ejlt.200700001

19. A. Jiménez, E. Izquierdo, F. Rodríguez, J.I. Dueñas and C. Tortosa, "Determinación de grasa y humedad en aceitunas mediante medidas de reflectancia en infrarrojo cercano," *Grasas y Aceites* **51**, 311 (2000).

20. A. García-Sánchez, N. Ramos Martos and E. Ballesteros, "Estudio comparativo de distintas técnicas analíticas (espectroscopía de NIR y RMN y extracción mediante Soxhlet) para la determinación del contenido graso y de humedad en aceitunas y orujo de Jaén," *Grasas y Aceites* **56**, 220 (2005).

21. Muik, B. Lendl, A. Molina-Díaz and M.J. Ayora- Cañada, "Fourier transform Raman spectrometry for the quantitative analysis of oil content and humidity in olives," *Appl. Spectrosc.* **57**, 233 (2003). doi: http://dx.doi.org/10.1366/ 00037020332 1535169.

22. L. Salguero-Chaparro, V. Beaten, J.A. Fernández-Pierna and F. Peña-Rodríguez, "Near infrared spectroscopy (NIRS) for on-line determination of quality parameters in intact olives," *Food Chem*. **139**, 1121 (2013). doi: http:// dx.doi.org/10.1016/j.foodchem.2013.01.002

23. A. Garcia and L. Léon, "Non-destructive assessment of olive fruit ripening by portable near infrared spectroscopy," *Grasas Aceites* **62**, 268 (2011). doi: http://dx.doi. org/10.3989/gya.089610

24. B. Muik, B. Lendl, A. Molina-Díaz and M.J. Ayora- Cañada, "Direct, reagent-free determination of free fatty acid content in olive oil and olives by Fourier transform Raman spectrometry," *Anal. Chim. Acta* **487**, 211 (2003). doi: http://dx.doi.org/10.1016/S0003-2670(03)00560-9

25. S. Armenta, S. Garrigues and M. de la Guardia, "Determination of edible oil parameters by near infrared spectrometry*," Anal. Chim. Acta* **596**, 330 (2007). doi: http://dx.doi.org/10.1016/j.aca.2007.06.028

26. A. Bendini, L. Cerratini, F. Di Virgilio, P. Belloni, M. Bonoli-Carbognin and G. Lercker, "Preliminary evalua- tion of the application of the FTIR spectroscopy to conrol the geographic origin and quality of virgin olive oils,"*J. Food Qual.* **30**, 424 (2007). doi: http://dx.doi.org/10.1111/ j.1745-4557.2007.00132.x

27. R.M. El-Abassy, P. Donfack and A. Materny, "Rapid determination of free fatty acid in extra virgin olive oil by Raman spectroscopy and multivariate analysis," *J. Am. Oil Chem. Soc.* **86**, 507 (2009). doi: http://dx.doi. org/10.1007/ s11746-009-1389-0

28. J.A. Cayuela Sánchez, W. Moreda and J.M. García, "Rapid determination of olive oil oxidative stability and its major quality parameters using Vis/NIR transmittance spectroscopy," *J. Agric. Food Chem*. **61**, 8056 (2013). doi: http://dx.doi.org/10.1021/jf4021575

29. R.J. Mailer, "Rapid evaluation of olive oil quality by NIR reflectance spectroscopy," *J. Am. Oil Chem. Soc.* **81**, 823 (2004). doi: http://dx.doi.org/10.1007/s11746-004-0986-4

30. J.A. Cayuela, J.M. García and N. Caliani, "NIR prediction of fruit moisture, free acidity and oil content in intact olives," *Grasas Aceites* **60**, 194 (2009). doi: http://dx.doi. org/10.3989/gya.097308

31. J.A. Cayuela and M.C. Pérez-Camino, "Prediction of quality of intact olives by near infrared spectroscopy," *Eur. J. Lipid Sci. Technol*. **112**, 1209 (2010). doi: http:// dx.doi.org/10.1002/ejlt.201000372

32. M. Manley and K. Eberle, "Comparison of Fourier trans- form near infrared spectroscopy partial least square regression models for South African extra virgin olive oil using spectra collected on two spectrophotometers at different resolutions and path lengths," *J. Near Infrared Spectrosc.* **14**, 111 (2006). doi: http://dx.doi.org/ 10.1255/ jnirs.597.

Capítulo 3.3. Resultados.

Un modelo RNA predictivo como simulador del proceso AOVE

Un modelo RNA predictivo como simulador del proceso AOVE

Abstract

Datos de variables de proceso y señales espectrales en la región del infrarrojo cercano (NIR) de la materia prima han permitido, mediante empleo de redes neuronales artificiales (ARN), diseñar modelos para la caracterización predictiva de productos y subproductos del proceso de elaboración del aceite de oliva virgen.

En este trabajo se exponen los resultados obtenidos mediante un sistema constituido por nueve redes neuronales que permite trabajar en tiempo real recogiendo información de sensores físicos como temperatura, caudales, intensidad de corriente, etc., y físico-químico como el espectro NIR de la masa de aceituna, para predecir las características del aceite de oliva virgen elaborado como objetivo de calidad.

Este sistema propuesto permite ser manejado tanto como 'simulador' para ajustar previamente las variables del proceso de acuerdo a los objetivos marcados en productividad o en calidad, como integrado en un sistema de control hacia la función de una 'planta virtual' que permita a dicho sistema ajustar en tiempo real las variables adecuadas para cumplir los objetivos.

Keywords: red neuronal artificial, aceite de oliva virgen, orujo, proceso de extracción

Abbreviations: **AOTF-NIR,** Acousto-Optical Tunable Filters-Near Infrared; **AOVE,** Aceite de oliva virgen extra; **CV**, Centrifuga vertical; **DCH,** Decanter centrifugo horizontal; $\mathbf{F_p}$**,** Caudal de alimentación al DCH; $\mathbf{F_{oi}}$, Caudal del aceite a CV; **Fw,** Adición de agua de dilución de la masa; **Fwi**, Caudal del agua a CV; **L,** Punto de descarga de la masa en el DCH (mm); **MTN,** Micro talco natural; $\mathbf{R_1}$**,** Posición punto de descarga del aceite del DCH (mm); **RER,** Rango de error relativo; **RMSEP,** Raíz del error medio cuadrático de la predicción; **RNA,** red neuronal artificial; **RPD,** Desviación residual predictiva; **Rv,** Revoluciones de molino; **Sd,** Grado de molienda; $\mathbf{T_m}$**,** Temperatura de la pasta; $\mathbf{t_m}$**,** Tiempo de batido; $\mathbf{T_o}$**,** Temperatura de la aceituna; $\mathbf{T_{oi}}$, Temperatura del aceite a CV; $\mathbf{T_{wi}}$, Temperatura del agua a CV.

1. Introducción

La elaboración del aceite de oliva es una actividad económica en gran crecimiento a nivel mundial. Para diferenciarse, la industria está optando por la reducción de costes de producción, aumentando la extractabilidad y/o aumento de la calidad del aceite. Esta situación obliga al sector a controlar todo el proceso minuciosamente. El proceso industrial de elaboración de aceite de oliva virgen extra (AOVE) muestra un elevado grado de complejidad debido a la naturaleza cambiante de la aceituna, lo que requiere de una constante regulación de las condiciones del proceso. Con la aplicación del sistema SCADA, este sector ha experimentado un gran avance en la gestión y control automático del proceso aunque este no llega a ser completo. Para un control eficiente del proceso es necesario disponer de una herramienta que permita conocer con antelación el comportamiento de la pasta de aceituna a lo largo del proceso de extracción, de tal manera que se puedan adaptar las diferentes variables del proceso a las características de la materia prima en función de los objetivos esperados.

En este sentido, la aplicación de las redes neuronales artificiales (RNA) con el apoyo de medidas basadas en sistemas de infrarrojo cercano (NIR), pueden constituir una herramienta viable. Los sistemas NIR por ser técnicas analíticas no destructivas, multiparamétricas, rápidas y fiables son muy usadas en diferentes estudios con aceitunas intactas[1–3] y para el análisis de aceite de oliva[4]. La incorporación de tecnologías NIR más actuales (Diodo Array, AOTF) basada en dispositivos ópticos permiten el escaneado de manera instantánea y continuada de la masa de aceituna, orujo o aceite de oliva adaptándose al proceso productivo.

Por otra parte, las redes neuronales artificiales se están implantando en diversos sectores debido a su capacidad de clasificar y predecir. Las RNAs son técnicas no-lineales que funcionan como las neuronas biológicas bajo un entrenamiento preciso. Se han aplicado para la clasificación de AOVE en función de su origen[5], evitar adulteraciones con otros tipo de aceites vegetales[6,7], determinar la carga de polifenoles en las aguas de almazara[8,9] o predecir los parámetros de calidad de los AOVE[10–13].Ya a nivel de proceso, se han realizado estudios[14,15] para la aplicación de las RNAs para predecir ‘on-line’ las pérdidas de graso en el orujo a partir de espectros de los aceites a su salida del decantador centrifugo horizontal y determinadas variables tecnológicas del proceso. Más recientemente, se combinaron ambas técnicas (RNAs y AOTF-NIR) para predecir

'on-line' la extractabilidad y las características potenciales del fruto a través de la masa de aceituna[16].

El objetivo de este trabajo fue diseñar modelos neuronales predictivos de las características del orujo y del AOVE, basados en RNAs a partir de los espectros de la pasta de aceituna proporcionada por AOTF-NIR, teniendo en cuenta las condiciones del proceso. A partir de las predicciones aportadas se puede actuar sobre las diferentes variables que interfieren en el mismo bajo los objetivos impuestos para conseguir un AOVE de extrema calidad con las mínimas pérdidas de grasa en los orujos optimizando el funcionamiento global del proceso de elaboración.

2. Materiales y métodos

2.1. *Muestras y métodos de referencia*

Se han empleado frutos de la variedad 'Picual', recolectados de la finca experimental del IFAPA en Mengíbar, (Jaén) que fueron molturadas inmediatamente a su recolección en la planta experimental del IFAPA Centro Venta del Llano. Dicha planta está compuesta por una línea de extracción de dos fases(Pieralisi, España) [14,16,17] de 45tn/día, y formada por un molino de martillos, una batidora de tres cuerpos (600kg), un decanter horizontal centrifugo trabajando en modo 2 fases y una centrifuga vertical para clarificar el aceite. Todo el proceso está controlado por el software de automación Procioleo (Procisa, Spain).

Los ensayos, modificando las diferentes variables del proceso, fueron realizados entre los meses de Noviembre y Febrero durante cinco campañas consecutivas y en las que tuvo lugar la recogida de datos espectrales NIR de pasta de aceituna, así como las correspondientes muestras físicas de orujo y AOVE para su posterior análisis. Todas las muestras correspondientes a un mismo ensayo se recogieron por triplicado.

A las muestras de orujo recogidas a la salida del decanter centrifugo horizontal, se les analizó la humedad (MP) y el contenido graso (FC) mediante el secado de las muestras en aire forzado de 105ºC(ISO 662:2016, 2016) y análisis en un equipo de resonancia magnética nuclear (RMN, Bruker, España) respectivamente. Todos los resultados se

expresaron en %. El contenido graso fue determinado sobre materia seca por (FDM) por $FDM(\%) = \left(\frac{FC}{100-MP}\right) * 100$

Las muestras de AOVE recogidas a la salida de la centrifuga vertical fueron filtradas y almacenadas a -15° hasta su análisis. Las determinaciones: acidez libre (% de ácido oleico), índice de peróxidos PV ($meqO_2/kg$) y los coeficientes K_{232}, K_{270} de absorción UV fueron determinadas siguiendo el método analítico descrito por la Unión Europea 1348/2013[19]. El contenido de carotenos y clorofilas (mg/Kg) fueron determinados por medidas de absorbancia a 470nm y 670nm respectivamente por el método de Minguez-Mosquera *et al.* [20].

El contenido en fenoles totales presentes en el aceite de oliva (mg/Kg de ácido caféico) se determinó mediante extracción de éstos con metanol:agua a partir de una solución de aceite en hexano y su concentración fue determinada mediante colorimetría medida a 725nm usando Folin-Ciocalteau reagent de acuerdo con Vázquez Rocero et. al. [21]. El contenido total de tocoferoles, en mg/kg, se determinó de acuerdo a la norma ISO 9936:2016[22] mediante HPLC y detección a 292nm.

2.2. *Análisis y tratamiento espectral*

En este estudio se utilizó un equipo Acousto-Optical Tunable Filters-Near Infrared (AOTF-NIR) Luminar 5030 (Brimrose Corp. USA) conectado, mediante fibra óptica, a un terminal de reflectancia situado en la mitad del primer cuerpo de la batidora de acuerdo con lo descrito en otros trabajos[16]. Por cada ensayo se escaneo por triplicado pasta de aceituna. Los espectros fueron tomados bajo un ratio de 10escaneos/s, en el rango de 1100-2500nm y a una resolución de 2nm. Estos espectros fueron sometidos a dos grupos de tratamientos. Un primer grupo, para eliminar los outliers, mediante análisis visual y screening PCA empleando la función Hotelling-T^2 del software 'The Unscrambler' (Unscrambler 7.5, Camo Inc.) y un segundo grupo de tratamientos consistentes en una reducción del rango a 1100-2150nm, un filtrado de las señales mediante la función Wavelet 'Daubechies' (db4), a nivel 4 y una corrección de la línea base mediante la 1ª derivada 'Savitzky-Golay (SG) con tres puntos de suavizado, a fin

de reducir ruidos, corregir la línea base y convertir el escaneado inicial en un espectro de sólo 39 puntos.

2.3. *Redes Neuronales Artificiales*

Las redes neuronales artificiales empleadas fueron del tipo 'feed-fordward back-propagation' de aprendizaje supervisado basado en un algoritmo de gradientes descendientes. Las ANNs fueron diseñadas en el programa Matlab software (Version 7.10.0.499, R2010a).

Las neuronas de la red conectadas por pesos son las encargadas de dar predicciones con el menor error, de ahí que los valores de los pesos deben ser optimizados por retroalimentación. El número de neuronas por capa (1-90), las funciones de transferencia entre capa ('tansig', 'logsig', 'purelin'), los algoritmos de entrenamiento ('trainrp', 'trainlm') y el número de iteraciones (50-1000) fueron probadas buscando la opción que ofreciera predicción con alto nivel de correlación (r) entre los datos reales y los estimados con el mínimo error posible (RMSEP) en el mínimo tiempo posible.

Para testar la precisión de las redes dos parámetros fueron calculados, RPD (Residual Predictive Deviation) y RER (Relative Error Range). Valores de RPD (ratio entre la SD y RMSEP) superiores a 3 indican que la red es capaz de aportar resultados fiables[23,24]. Valores superiores a 10 para el parámetro RER (relación entre el rango de validación y RMSEP) indican que la calibración puede ser utilizada en el control de calidad[23,24].

Para evaluar la robustez de la predicción de los modelos neuronales desarrollados, se aplica un t_e-Test de comparación de medias entre muestras pareadas, para el 95% de confianza, sobre datos procedentes de ensayos efectuando en otra campaña, la cual no ha sido empleada en el desarrollo formal de las RNA´s.

3. Resultados

3.1. *Datos para la construcción de las RNA*

Para el diseño y construcción de RNA basadas en la supervisión de los modelos obliga, necesariamente, al uso de datos reales experimentales que les permita aprender y predecir de forma razonable de acuerdo a la 'educación' recibida. Para el caso de este estudio, el seguimiento realizado del proceso de elaboración del AOVE a lo largo de las diferentes campañas oleícolas, ha permitido reunir en una base de datos una gran cantidad de información acerca del comportamiento de éste ante diferentes situaciones inferidas. Dicho proceso se ve sometido a una gran cantidad de perturbaciones originadas, fundamentalmente, por las características del fruto a procesar y a los objetivos a cumplir con éste. Perturbaciones que se traducen en las diferentes variables que hay que manejar en el proceso de acuerdo a criterios de extractabilidad o de características del aceite a extraer. Por ello es necesaria una base de datos amplia, que recoja la mayor variabilidad posible de todas y cada una de las variables operativas. De esta forma las RNA podrán aprender con eficacia aportando modelos predictivos fiables. En la Tabla 1, se detallan las diferentes variables del proceso AOVE que se han considerado, organizadas de acuerdo a la etapa del proceso en las que intervienen, así como los rangos, mínimo-máximo, entre los que se ha trabajado a lo largo de los 693 ensayos llevados a cabo, siendo éstas las más habituales en la optimización del proceso.

Tabla 1. Variables tecnológicas y mecánicas del proceso

Fase del proceso	**Parámetros**	**Abreviación**	**Rango valores (Min-max)[1]**
Acondicionamiento de la pasta	Temperatura de la aceituna (°C)	To	2.5-19.1
	Grado de molienda (mm)	Sd	4-7
	Revoluciones de molino (rpm)	Rv	2000-3000
	Temperatura de la pasta (°C)	Tm	9-36.7
	Tiempo de batido (minutos)	tm	35-175
	Adición de MTN (%)	MTN	0-1
Centrifugación y extracción	Adición de agua de dilución de masa (L/h)	Fw	0-200
	Caudal de alimentación al DCH (kg/h)	Fp	460-1300
	Punto de descarga de la masa en el DCH (mm)	L	0-27.5
	Posición punto de descarga del aceite del DCH (mm)	R_1	98-101
Clarificación del AOVE en CV	Temperatura del aceite a CV (°C)	Toi	13-3.5
	Temperatura del agua a CV (°C)	Twi	9.2-34
	Caudal del aceite a CV (L/h)	Foi	58.5-511.9
	Caudal del agua a CV (L/h)	Fwi	0-655.5

[1] para un total de experimentos de n=693.

El ajuste de estas variables de proceso es necesario llevarlo a cabo, ya que, debido a que el fruto no presenta siempre unas características constantes, sino que de acuerdo a su estado de maduración, variedad o campaña agrícola, el fruto presenta cambios importantes en sus características fenológicas y composicionales que afectan a la capacidad extractiva del proceso y a las características de los aceites que se obtienen. Por este motivo el conocimiento previo de las características del fruto es imprescindible, y a considerar en el desarrollo de los modelos RNA predictivos. En este trabajo, para dicha caracterización, se ha apostado por el empleo de la tecnología NIR, cuya aplicabilidad esta ya demostrada, y su integración en la línea de proceso nos permite obtener la información en tiempo real que se precisa. En la Figura 1 se muestra un esquema resumido del proceso AOVE, con sus principales etapas, y la localización del punto de monitorización del fruto, molido en este caso.

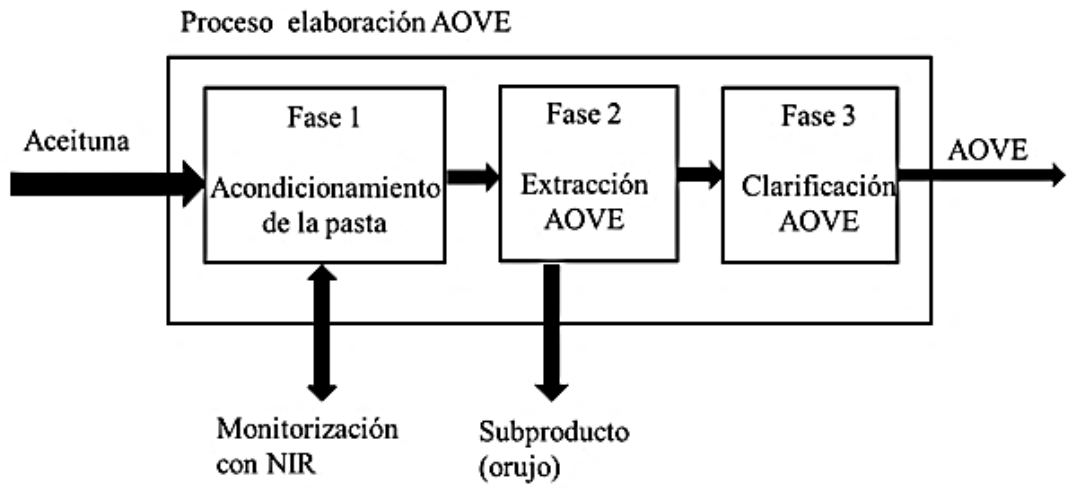


Figura. 1. Esquema de las diferentes fases del proceso de extracción del AOVE y situación del sensor NIR de monitorización dentro de la fase.

Variables del proceso y señales espectrales NIR constituyen, por tanto, los datos de entrada a la red; pero ésta necesita de los objetivos a cumplir para poder ser modelada. En la Tabla 2, se detallan los dos principales objetivos del proceso considerados y la información necesaria en cada uno de ellos, siendo ésta la que formará la salida de las RNA. Para el rendimiento industrial del proceso se acude a la extractabilidad, la cual se mide por la pérdida de aceite en el subproducto orujo y para lo cual es necesario conocer dos parámetros relacionados: el contenido graso y la humedad del producto. Para la caracterización del aceite se han seleccionado varios parámetros analíticos

relacionados con su calidad y características nutricionales. La Tabla 2 muestra estos parámetros y los rangos de valores empleados tanto para la fase de entrenamiento de la RNA como para su validación. En dicha tabla se puede apreciar la gran variabilidad conseguida a lo largo de los diferentes años, cubriendo ampliamente los valores normales de cada uno de los parámetros considerados además de los valores extremos poco habituales pero enriquecedores para el aprendizaje de las RNA.

Tabla 2. Datos analíticos del proceso

Objetivos (Productos)	**Parámetros**	**Datos entrenamiento**		**Datos Validación**	
		Rango (min-max)	**SD**	**Rango(min-max)**	**SD**
Extractabilidad (Orujo)	Contenido graso (%)	1.66-5.89	0.72	2.15-5.92	0.7
	Contenido en humedad (%)	51.57-63.47	3.52	56.98-75.42	3.48
Características AOVE	Acidez (% of ácido oléico)	0.10-2.56	0.44	0.11-2.57	0.45
	I. Peróxidos ($mEqO_2/kg$)	1.37-18.25	3.08	1.48-18.96	3.14
	K_{232}	1.29-2.70	0.19	1.09-2.64	0.20
	K_{270}	0.07-0.22	0.027	0.07-0.2	0.026
	Polifenoles T. (mg/kg)	80-502	89.82	80-502	90.04
	Carotenos (mg/kg)	2.8-11.7	1.91	2.7-11.6	1.27
	Clorofilas(mg/kg)	0.8-15.6	2.97	0.9-15.2	2.95

3.2. *RNA para la extractabilidad del proceso del AOVE*

Como se ha indicado en el apartado anterior, el rendimiento del proceso o capacidad extractiva del mismo, ha sido asociado en éste trabajo con la cantidad de aceite con que se obtiene el subproducto orujo. Éste tiene su salida del proceso al final de la segunda etapa, donde se realiza la separación de fases sólidas-líquidas (Fig. 1), por lo que las variables a tener en cuenta para formar el vector de entrada a la red, junto a la información espectral NIR de la masa entrante el proceso, han sido las que caracterizan al proceso de acondicionamiento de la pasta y al de extracción centrífuga, tal y como se especifican en la Tabla 1. El vector de salida de la red ha sido asociado a un único parámetro, por lo que se han modelado dos RNA, cada una con una salida diferente: para el contenido graso en húmedo y para el contenido en humedad (Tab.2). Las predicciones de ambas redes permiten calcular la pérdida de grasa en el orujo, referida a materia seca, que es la forma habitual en esta industria de visualizar la extractabilidad del proceso.

En la Tabla 3 puede apreciarse las características de los dos mejores modelos neuronales obtenidos para este objetivo. El entrenamiento de las redes, con 465 datos, ha permitido definir dos RNA con tres capas: la de entrada, una oculta y la de salida, siendo la del parámetro del contenido en humedad la que más neuronas ha necesitado en las dos primeras. De todas las funciones de transferencia entre capas probada, la que mejor resultados ha dado, en general, ha sido la función tipo 'Sigmoide' (Tsg), función muy común, en los trabajos realizados en este campo, por su forma de evolución, si bien, para el caso del contenido en grasa, la salida de la red se ha mejorado ligeramente empleando una función de transferencia lineal (PLn). En ambos casos, la función de aprendizaje más apropiada ha sido la 'Trainrp', con la que han sido necesarias unas 185 iteraciones solamente para conseguir los mejores resultados predictivos durante la validación de las redes con los 231 datos restantes. La correlación encontrada entre los valores predichos y los datos reales de los métodos de referencia es altamente significativa ($r \geq 0{,}90$) y con errores de predicción (RMSEP) similares a los encontrados mediante otras técnicas analíticas que miden directamente sobre el subproducto.

En el estudio de la determinación del contenido graso y de humedad en el orujo de dos fases a través de sistemas NIR at-line se encontraron correlaciones de 0.97 y 0.88 para el contenido graso y humedad respectivamente, así como errores de 0.24% y 1.19% respectivamente[25]. En otro trabajo de comparación de técnicas NIR y Raman, se encontraron altas correlaciones (0.92 y 0.95) con bajos RMSEP (0.21%, 2.1%) en sus análisis del contenido graso y de humedad en los orujos para el caso del NIR[26]. Errores más bajos del orden del 0.11% para el contenido graso y 0.60% para el contenido en humedad de los orujos se obtuvieron en el estudio comparativo de distintas técnicas analíticas[27]. La combinación de redes neuronales artificiales y sistemas NIR utilizada por Jiménez *et al.*[15]para predecir las características del orujo on-line obtuvo excelentes correlaciones del orden de 0.9804 y 0.9796 para el contenido graso y humedad respectivamente, con errores del 0.20 y 0.55%[15].

Empleando los datos de ensayo no implicados en el proceso de modelado y construcción de las redes neuronales se ha verificado la robustez de éstos al aplicarle el t_e-Student. En la Tabla 4 se muestran las condiciones de procesado de diferentes ensayos, junto con los valores predichos por las RNA´s, los valores reales de laboratorio y el porcentaje de error entre ellos. Se puede apreciar como las predicciones son

similares a los valores reales, con porcentaje de error inferior al 10%, no existiendo diferencias significativas, al 5 %, entre los valores medios obtenidos, lo que confirma la robustez de los modelos desarrollados.

Tabla 3. Topologías óptimas de las RNA obtenidas para el orujo y características AOVE.

Parámetros	NT/NV[1]	RNA Entrenamiento				RNA Validación			
		Capas-Neuronas	Transfer Layer F.	Train. F.	Iters.	r	RMSEP	RPD	R E R
Olive Orujo									
Contenido graso (%)	462/231	57/5/1	Tsg/Tsg/PLn	Trp	185	0.90	0.31	2.42	12.16
Contenido humedad (%)	462/231	83/16/1	Tsg/Tsg/ Tsg	Trp	185	0.90	1.56	2.23	11.84
AOVE									
Acidez (% of ácido oléico)	86/43	40/14/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	250	0.98	0.09	5.06	27.73
I. Peróxidos($mEqO_2/kg$)	86/43	69/14/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	50	0.94	1.09	2.88	16.03
K_{232}	86/43	29/14/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	50	0.84	0.11	1.84	14.42
K_{270}	86/43	59/15/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	50	0.72	0.02	1.44	7.22
Polifenoles T.(mg/kg)	86/43	70/7/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	100	0.96	26.5	3.40	15.91
Carotenos (mg/kg)	86/43	49/25/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	100	0.97	0.49	2.56	18.01
Clorofilas (mg/kg)	86/43	70/35/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	75	0.96	0.82	3.60	17.43

[1]NT: número de datos de entrenamiento NV: número de datos de validación; Tsg: función de transferencia tan-sigmoidal; PLn: función de transferencia linear; Lsg: función de transferencia log-sigmoidal; Trp: función de entrenamiento Resilient Backpropagation

Tabla 4. Condiciones de proceso de varios ensayos dieron cuenta de validez externa de las ARNs.

Ensayo	Condiciones del Proceso										Características orujo					
											Contenido graso (%)			Humedad (%)		
	Sd	R v	R_i	L	To	Tm	MTN	tm	Fw	Fp	Real	RNA	E	Real	RNA	E
1	4	2200	98	0	13	18.8	0	95	42	900	3.21	3.70	15.26	64.22	65.92	2.65
2	4	2200	98	0	14.9	24.4	0	80	115	910	2.75	2.39	13.09	61.01	62.38	2.25
3	5	2200	98	0	9.3	16.2	0	93	26.5	905	2.75	2.72	1.09	61.04	62.41	2.24
4	6	2200	98	0	2.6	13.4	0	70	80	960	3.42	3.43	0.29	63.94	61.46	3.88
5	5	2200	98	0	7.1	16.9	0	86	71	906	2.54	2.73	7.48	64.05	64.22	0.27

*Abreviación de acuerdo con Tabla 1; %E. Porcentaje de error% = |Real-ANN/Real|*100

En la Tabla 4, se muestran los resultados del test aplicado al comparar predicciones obtenidas por los modelos al aplicar diferentes condiciones del proceso reales. Los datos empleados (99) para la realización de dicho test fueron diferentes a los usados en el diseño y construcción de los modelos. Con los diferentes ensayos, se aprecia valores similares entre los reales y los predichos, con porcentajes de error, en general inferior al 10%. Una prueba t_e-Student muestra, para cada uno de los parámetros, que no existen diferencias significativas, al 5% entre los valores medios obtenidos (actual vs predichos), lo cual confirma la robustez de las RNA desarrolladas.

3.3. *RNA par alas características del AOVE*

Para el objetivo de caracterización predictiva del aceite al final del proceso de elaboración, el diseño de los modelos neuronales contempla todas las etapas de dicho proceso, por lo que el vector de entrada a la red se ha ampliado con las variables características de la etapa de clarificación (Tab.1). Junto a estas variables dentro del vector entrada se incluyen los datos espectrales NIR de la pasta de aceituna. Como para el caso anterior, el vector de salida se ha asociado a un único parámetro característico del aceite, cuyos rangos de valores pueden apreciarse en la Tabla 2, lo que ha supuesto la construcción de siete modelos neuronales que permiten realizar predicciones sobre las características de calidad reglada, así como sobre las características nutricionales derivadas de los compuestos bioactivos considerados.

En el diseño de los modelos neuronales se ha seguido el protocolo utilizado en el diseño de los modelos creados para la extractabilidad del proceso. Los datos usados para el entrenamiento y validación fueron menores, en total 591, debido a la eliminación de outliers. Para el entrenamiento se usaron 394 datos para definir las redes. Al igual que el caso anterior, la red estaba compuesta por tres capas. El número de neuronas por capa fue diferente en cada caso como se aprecia en la Tabla 3, con el número más bajo en la capa oculta para la red de polifenoles teniendo a su vez uno de los números más elevados de neuronas en la capa de entrada, al igual que los clorofilas. Todas las redes coincidieron en la forma de trasferir los pesos entre capas, realizándola de forma ‘logarítmica’ (Lsg) para la capa de entrada y la capa oculta, sin embargo para la capa de salida se optó por la función ‘sigmoidal’ (Tsg). La función de entrenamiento utilizada fue ‘Trainrp’ por ser la más rápida de ejecución. Los mejores resultados se obtuvieron a

diferentes iteraciones en cada caso, oscilando desde 50 para peróxidos y hasta 250 para la red de la acidez.

Los modelos predictivos desarrollados consiguieron buenas correlaciones con valores r: 0.72-0.98, siendo los más bajos los coeficientes de absorción UV. Los demás parámetros estuvieron todos por encima de 0.94 con errores de predicción bajos. El indicador de calidad RER, con valores superiores al óptimo 10[23,24] confirma la buena capacidad predictiva de las redes, aunque para el parámetro RPD sólo los modelos neuronales de los parámetros de acidez, polifenoles totales y pigmentos clorofílicos fueron superiores al valor óptimo de 3.

En otros trabajos, se pudo comprobar la versatilidad de los sistemas de infrarrojo cercano en el análisis on-line del aceite de oliva para la construcción de modelos PLS para la determinación de la acidez[28–30] y otros parámetros como los pigmentos[29,30] aportando buenos resultados de validación con correlaciones superiores a R^2 a 0.89. Así mismo, otros estudios llevados a cabo para estimar en tiempo real la acidez y peróxidos de AOVE desarrollaron modelos neuronales con altos errores de predicción y errores medios por debajo del 6% para la acidez y 5% para los peróxidos[11–13].

Recientemente, en los resultados obtenidos en estudios previos a este trabajo, se pudo comprobar la robustez de las RNA para predecir las características potenciales del AOVE, a partir de la información espectral del fruto entrante[16], aunque para ello el aceite a caracterizar fue obtenido por el sistema Abencor a escala de laboratorio.

Al igual que en los modelos para la caracterización del orujo, las predicciones de las redes para AOVE fueron sometidas a un t_e-Student a partir de datos de ensayos que no han sido empleados en el modelado, para confirmar la fiabilidad y eficacia de los resultados estimados por los modelos. Dicho test no encontró diferencias significativas entre los datos de referencia de laboratorio y los estimados por los modelos, confirmando la robustez de los mismos. Las Tabla5a,b muestran algunos ensayos realizados a los que se les aplicó dicho test. En ellas se puede comprobar la gran variabilidad de datos con porcentajes de error por debajo del 15% en todos los casos a excepción de los parámetros de absorción UV, cuyos modelos dieron las mínimas correlaciones.

Tabla 5a). Condiciones del proceso en el ensayo de prueba para los modelos de las características AOVE.

Ensayo	Condiciones del proceso*											
	Sd	**Rv**	**R1**	**L**	**To**	**Tm**	**MTN**	**tm**	**Fw**	**Fp**	**Foi**	**Fwi**
1	4	2200	98	0	13	18.8	0	95	42	900	173	86
2	4	2200	98	0	14.9	24.4	0	80	115	910	90	22
3	5	2200	98	0	9.3	16.2	0	93	26.5	905	450	435
4	6	2200	98	0	2.6	13.4	0	70	80	960	141	528
5	5	2200	98	0	7.1	16.9	0	86	71	906	99	489

*Abreviaciones de acuerdo con la Tabla 1

Tabla 5.b) Características del AOVE en cada ensayo de la validación externa.

Características AOVE	Ensayo	1	2	3	4	5
Acidez (%ácido oléico)	Real	0.22	0.22	0.23	0.17	0.14
	RNA	0.23	0.21	0.22	0.16	0.14
	% E	4.5	4.5	4.5	5.9	0.00
I. Peróxidos ($mEqO_2/kg$)	Real	4.00	3.39	2.36	2.04	2.72
	RNA	3.86	3.39	2.69	2.26	2.65
	% E	3.50	0.00	13.98	10.78	2.57
K_{232}	Real	1.59	1.72	1.56	1.50	1.42
	RNA	1.60	1.63	1.51	1.49	1.42
	% E	0.63	5.23	3.21	0.67	0.00
K_{270}	Real	0.18	0.24	0.15	0.13	0.09
	RNA	0.18	0.19	0.14	0.13	0.11
	% E	0.00	20.83	6.67	0.00	22.2
Polifenoles (mg/kg)	Real	289	376	388	199	215
	RNA	309	354	351	185	226
	% E	6.92	5.85	9.54	7.04	5.12
Carotenos (mg/kg)	Real	11.6	19.1	12.7	12.7	14.5
	RNA	12.6	18.5	12.9	12.5	14.5
	% E	8.62	3.14	1.57	1.57	0.00
Clorofilas (mg/kg)	Real	11.6	19.1	12.7	12.7	14.5
	RNA	13.0	18.4	12.0	13.4	14.7
	% E	12.07	3.66	5.51	5.51	1.38

4. Conclusiones

Datos históricos del proceso y características espectrales NIR, del producto entrante al proceso, han permitido modelar éste mediante el empleo de RNA´s. Estas RNA´s actúan como algoritmos predictivos de propiedades de los aceites y subproductos obtenidos, a partir de la información de las características del fruto y de las condiciones de trabajo establecido mediante las variables del proceso.

El conjunto de modelos RNA´s desarrollados permite definir una herramienta tipo 'simulador' global del proceso AOVE. Este simulador puede realizar una optimización predictiva del proceso, a partir de una base de datos espectrales NIR o mediante escaneado en tiempo real, ajustando aquellas variables que permitan conseguir ciertos objetivos como el disminuir las pérdidas de aceite, de obtener aceites con determinadas características, etc.

Referencias

1. L. Salguero-Chaparro, V. Baeten, J.A. Fernández-Pierna and F. Peña-Rodríguez,"Near infrared spectroscopy (NIRS) for on-line determination of quality parameters in intact olives," *Food Chem.* **139**, (1-4), 1121–1126, (2013).

2. L. Salguero-Chaparro and F. Peña-Rodríguez," On-line versus off-line NIRS analysis of intact olives," *LWT - Food Sci. Technol.* **56** (2), 363–369 (2014).

3. E. Stella, R. Moscetti, R.P. Haff, D. Monarca, M. Cecchini, M. Contini and R. Massantini, "Review: Recent advances in the use of non-destructive near infrared spectroscopy for intact olive fruits," *J. Near Infrared Spectrosc.* **23**, 197–208 (2015).

4. M. Casale and R. Simonetti, "Review: Near infrared spectroscopy for analysing olive oils," *J. Near Infrared Spectrosc.* **22**, 59–80(2014).

5. J.S.Torrecilla, J.C. Cancilla, G. Matute, and P. Díaz-Rodríguez, "Neural network models to classify olive oils within the protected denomination of origin framework," *Int. J. Food Sci. Technol.* **48**, 2258–2534 (2013).

6. R. Aroca-Santos, J.C. Cancilla, G. Matute and J.S. Torrecilla, "Identifying and Quantifying Adulterants in Extra Virgin Olive Oil of the Picual Varietal by Absorption Spectroscopy and Nonlinear Modeling," *J. Agric. Food Chem.* **63** (23), 5646–5652 (2015).

7. J.S.Torrecilla, S. Vidal, R. Aroca-Santos, S.C.Wang and J.C. Cancilla, "Spectroscopic determination of the photodegradation of monovarietal extra virgin olive oils and their binary mixtures through intelligent systems". *Talanta* **144**, 363–368 (2015).

8. J.S.Torrecilla, M.L. Mena, P. Yáñez-Sedeño and J. García, "Field determination of phenolic compounds in olive oil mill wastewater by artificial neural network," *Biochem. Eng. J.* **38** (2), 171–179 (2008).

9. J.S.Torrecilla, M.L. Mena, P. Yáñez-Sedeño and J. García, "Application of artificial neural network to the determination of phenolic compounds in olive oil mill wastewater," *J. Food Eng.* **81** (3), 544–552 (2007).

10. S. Faria, C. A. Rodrigues, R. Nunes and R. M. dos Santos, "Evaluation of extra virgin olive oil stability by artificial neural network," *Food Chem.* **179**, 35–43 (2015).

11. R. Furferi, L. Governi and Y. Volpe, "ANN-based method for olive Ripening Index automatic prediction," *J. Food Eng.*, **101**, 318–328 (2010).

12. R. Furferi, M. Carfagni and M. Daou, "Real-time estimation of peroxides and acidity level of extra-virgin olive oil: an integrated approach," *Int. J. Math. Comput. Simul.* **2** (2)(2008).

13. R. Furferi, M. Carfagni and M. Daou, "Artificial neural network software for real-time estimation of olive oil qualitative parameters during continuous extraction," *Comput. Electron. Agric.* **55**, 115–131 (2007).

14. A. Jiménez, M.P. Aguilera, M.Uceda and G. Beltrán, "Neural network as tool for virgin olive oil elaboration process optimization," *J. Food Eng.*, **95** (1), 135–141(2009).

15. A. Jiménez, G. Beltrán, M.P. Aguilera and M. Uceda, "A sensor-software based on artificial neural network for the optimization of olive oil elaboration process," *Sensors Actuators, B Chem.* **129** (2), 985–990 (2008).

16. Y.Allouche, E. Funes, G. Beltrán and A. Jiménez, "Near infrared spectroscopy and artificial neural network to characterise olive fruit and oil online for process optimisation," *J. Near Infrared Spectrosc.* **23**, 111–121 (2015).

17. A. Jiménez, M. Hermoso and M. Uceda, "Elaboración del aceite de oliva virgen mediante sistema continuo en dos fases. Influencia de diferentes variables del proceso en algunos parámetros relacionados con la calidad del aceite," *Grasas y Aceites*, **46** (4-5), 299–303 (1995).

18. ISO 662:2016. Animal and vegetable fats and oils. Determination of moisture and volatile matter content. 2016.

19. Official Journal European Union. *Commission Implementing Regulation (EU) No. 1348/2013 amending Regulation (ECC) No 2568/91 on the characteristics of olive oil and olive-residue oil and on the relevant methods of analysis.* (2014).

20. M.I. Mínguez-Mosquera, B. Gandul-Rojas, A. Montaño-Asquerino and J. Garrido-Fernández, "Determination of chlorophylls and carotenoids by high-performance liquid chromatography during olive lactic fermentation," *J. Chromatogr.* **585**, 259–266 (1991).

21. A. Vázquez-Roncero, C. Janer del Valle and M.L. Janer del Valle, "Determinación de los polifenoles totales del aceite de oliva," *Grasas y Aceites* **24**, 350 (1973).

22. ISO 9936:2016. Animal and vegetable fats and oils. Determination of tocopherols and tocotrienols contents by High-performance liquid chromatography, p 16(2016).

23. P.C. Williams and D.C. Sobering, "How do we do it: a brief summary of the methods we use in developing near infrared calibrations," In *Near Infrared Spectroscopy: the Future Waves.*; A.M.C. Davies, P.C. Williams, Eds.; NIR Publications: Chichester, UK, pp 185–188 (1996).

24. P.C. Williams and D.C. Sobering, "Comparison of commercial Near-Infrared Transmittance and Reflectance instruments for analysis of whole grains and seeds," *J. Near Infrared Spectrosc.* **1**, 25–32 (1993).

25. J.A. Garcia, M. Hermoso and P. Cáceres, "Determination of oil and moisture in two-phases olive-pomace by using near-infreared spectroscopy," *Grasas y Aceites* **47**, 317–322 (1996).

26. B. Muik, B. Lendl, A. Molina-Díaz, L. Pérez-Villarejo and M.J. Ayora-Cañada, "Determination of oil and water content in olive pomace using near infrared and Raman spectrometry. A comparative study," *Anal. Bioanal. Chem.* **379**, 35–41 (2004).

27. A. García-Sánchez, N. Ramos Martos and E. Ballesteros, "Estudio comparativo de distintas técnicas analíticas (espectroscopía de NIR y extracción mediante Soxhlet) para la determinación del contenido graso y de humedad en aceitunas y orujo de Jaén", *Grasas y Aceites*, **56** (3), 220–227 (2005).

28. Bendini, A.; Cerretani, L.; Di Virgilio, F.; Belloni, P.; Lercker, G.; Toschi, T. G. In-process monitoring in industrial olive mill by means of FT-NIR. *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **2007**, *109*, 498–504.

29. A. Jiménez, A. Molina and M.I. Pascual, Using optical NIR sensor for on-line virgin olive oils characterization. *Sensors Actuators, B Chem.* ***107,*** 64–68 (2005).

30. A. Jiménez, "Monitoring carotenoid and chlorophyll pigments in virgin olive oil by visible-near infrared transmitance spectroscopy. On-line application," *J. Near Infrared Spectrosc.* **11**, 219–226 (2003).

Capítulo 3.4. Resultados

Modelado de las primeras fases del proceso de extracción de aceite de oliva virgen usando la inteligencia artificial

Modelado de las primeras fases del proceso de extracción de aceite de oliva virgen usando la inteligencia artificial

Abstract

Modelos predictivos basados en redes neuronales artificiales que sean capaces de pronosticar cuantitativamente las características principales (humedad, impurezas y contenido en antioxidantes naturales) del mosto oleoso a su salida del decanter y del orujo (contenido graso y de humedad). Este hecho se llevará a cabo con la ayuda de la información espectral de la pasta de aceituna aportada por sensores ópticos AOTF-NIR y las diversas variables que intervienen en las fases de preparación de la pasta y de extracción del aceite de oliva virgen. Buenos resultados de predicción con valores de r: 0.97, 0.93, 0.94, 0.90 y 0.90 y RMSEP: 2.05%, 0.68%, 335mg/kg, 0.31% y 1.56 para humedad, impurezas y polifenoles totales, contenido graso y de humedad del orujo, respectivamente. La fiabilidad de las redes fue comprobada a través de los indicadores RPD y RER de la validación interna y a través de un t_e-Student (95% de confianza) aplicado a una validación externa. No fueron encontradas diferencias significativas entre los datos reales y los estimados.

Keywords: red neuronal artificial, aceite de oliva, orujo, proceso de extracción

Abbreviations: **AOTF-NIR,** Acousto-Optical Tunable Filters-Near Infrared; **AOVE,** Aceite de oliva virgen extra; **CV**, Centrifuga vertical; **DCH,** Decanter centrifugo horizontal; $\mathbf{F_p}$**,** Caudal de alimentación al DCH; $\mathbf{F_{oi}}$, Caudal del aceite a CV; **Fw,** Adición de agua de dilución de la masa; **L,** Punto de descarga de la masa en el DCH (mm); **MTN,** Micro talco natural; $\mathbf{R_1}$**,** Posición punto de descarga del aceite del DCH (mm); **RER,** Rango de error relativo; **RMSEP,** Raíz del error medio cuadrático de la predicción; **RNA,** red neuronal artificial; **RPD,** Desviación residual predictiva; **Rv,** Revoluciones de molino; **Sd,** Grado de molienda; $\mathbf{T_m}$**,** Temperatura de la pasta; $\mathbf{t_m}$**,** Tiempo de batido; $\mathbf{T_o}$**,** Temperatura de la aceituna.

1. Introducción

El proceso de obtención del aceite de oliva virgen a partir del fruto de la aceituna, esta formado por una serie de operaciones básicas de transferencia de calor, transporte de masas, filtraciones y sedimentaciones. Este proceso que emplea únicamente procedimientos físicos, tiene como principal objetivo extraer la máxima cantidad de aceite de una masa semisólida formada por restos de piel, huesos y pulpa. El decantador centrífugo horizontal (DCH), es el encargado de separar el aceite del resto de componentes, aunque éste sale con algo de humedad y materias sólidas finas así como el subproducto, orujo con cierto grado de grasa y humedad en función del sistema de elaboración empleado(Jiménez A., Hermoso, M., Uceda, 1995). Las visualizaciones periódicas de ambas salidas es una práctica muy habitual para controlar el proceso. Para conseguir un correcto agotamiento, el aceite debe salir ligeramente sucio. Un aceite con demasiados finos y agua o excesivamente limpio es un indicador de pérdida de graso en el orujo(Cárdenas and Marcos, 2013). Para verificar esta situación es necesario recurrir al análisis de orujos, los cuales se suelen realizar en un laboratorio off-line. La información que desprenden los análisis no es percibida por el operador hasta días después, no siendo una práctica operativa para la regulación de las variables del proceso. Para ello, son muchos los estudios que se han llevado a cabo para resolver parte de este problema mediante la instalación de sensores NIR que proporcionen está información ‘at-line’ u ‘on-line’. Casale & Simonetti (2014) reflejan algunos trabajos de monitorización on-line del proceso de extracción dentro de la revisión elaborada donde muestran las diferentes aplicaciones de la tecnología NIR en el sector del aceite de oliva. Esta tecnología ha tenido un gran auge por tratarse de una técnica instantánea, limpia, barata y respetuosa con el medio ambiente. Bendini el at. (2007) utilizó FT-NIR en la almazara para desarrollar modelos PLS para analizar la acidez de los aceites(Bendini et al., 2007). Relacionado a este estudio Molto-García et al. (2003) desarrolló un sensor NIR para determinar la acidez y los peróxidos consiguiendo buenos resultados similares a los obtenidos por los métodos de referencia por un laboratorio(Molto-Garcia et al., 2003). Jiménez et al.(Jiménez et al., 2005) testó la fiabilidad del sensor NIR desarrollado para monitorizar los cambios producidos en los aceites de oliva durante su producción. Con ello, los autores mencionados concluyen que los sensores NIR pueden ser considerados como una rápida herramienta para monitorizar on-line determinadas características de los aceites durante su producción.

Sin embargo, debido a la naturaleza cambiante de la materia prima, las variables no pueden considerarse constantes y continuamente debe adaptarse al modelado del proceso de acuerdo a los objetivos marcados en ese momento. La respuesta a la complejidad del proceso se puede encontrar en las redes neuronales artificiales. Se trata de un sistema de procesamiento de información en paralelo distribuido masivo que presenta determinadas características de funcionamiento que se asemeja a redes neurales biológicas del cerebro humano(Satish and Pydi Setty, 2005). Este sistema de procesamiento está compuesto por ecuaciones algebraicas lineales que le confieren las características de sencillez y rapidez a la hora de resolver problemas complejos de modelización, optimización y control de procesos. Los modelos neuronales a través entrenamientos sucesivos son capaces de aprender con ejemplos, para incorporar muchas variables, y ofrecer respuestas rápidas y adecuadas a cualquier nueva información no presentada anteriormente, por lo que no necesitan saber con antelación la relación entre los datos de entrada y de salida. Este hecho le confiere a las redes neuronales artificiales una gran ventaja frente a otras técnicas. Varios autores han aprovechado las ventajas que ofrecen las redes para aplicarlo a diversas áreas alimentarias, desde el modelo de la esterilización de alimentos(Gonçalves et al., 2005), para el modelado del secado del tomate(Movagharnejad and Nikzad, 2007), el modelado de la ultrafiltración del zumo de manzana(Gökmen et al., 2009) entre otras como se puede observar en la revisión de redes neuronales (Funes et al., 2015). Así mismo, esta aplicación ha llegado al sector del aceite de oliva para predecir características de los aceites como acidez y peróxidos(Furferi et al., 2010, 2008, 2007), para clasificación de los aceites(Tanajura da Silva et al., 2015; Torrecilla et al., 2013), evaluar su estabilidad (Faria et al., 2015),identificar adulteraciones(Aroca-Santos et al., 2015) o como herramienta de optimización del proceso de producción(Allouche et al., 2015; Jiménez et al., 2008; Jiménez Marquez et al., 2009).

En base a esto, las redes neuronales artificiales pueden ser clave en la modelización del proceso de extracción en sus diferentes etapas. Esta singularidad facilita la adaptación de cualquier almazara que disponga de decantación estática y/o dinámica para la etapa de clarificación. Por ello este trabajo tiene como objetivo la creación de modelos predictivos neuronales que sirvan de base para la modelización de las etapas de preparación y extracción de aceite de oliva virgen para conseguir la mayor

extractabilidad con los más altos rendimientos sin perder la calidad nutricional y sensorial de los aceites producidos.

2. Material y métodos

2.1. *Materia prima y ensayos*

Este trabajo fue realizado en la almazara experimental del IFAPA Centro 'Venta del Llano' en Mengíbar (Jaén) equipada con un sistema continuo de extracción de 45Tm/24h de capacidad constituida básicamente por un molino de martillos y una batidora horizontal de 3 cuerpos de 600kg, un decantador centrífugo horizontal (DCH) y centrifuga vertical de platos(Allouche et al., 2015; Jiménez et al., 2008; Jiménez Marquez et al., 2009). Las aceitunas de la variedad 'Picual 'utilizadas recolectadas mecánicamente con diferente grado de maduración. De acuerdo con las características de la materia prima, se realizaron varios ensayos en los que se llevó a cabo un control exhaustivo del proceso en todas sus fases y en concreto la preparación de la pasta y la extracción del aceite.

En cada ensayo fueron recogidos espectros de la pasta de aceituna ya molida en el primer cuerpo de la batidora. Tras la preparación de dicha pasta se procedió a la fase de extracción en el decanter horizontal centrífugo, del cual se recogieron muestras de orujo y de mosto oleoso. Dichas muestras, que corresponden a la masa anteriormente controlada, fueron recogidas por triplicado manteniendo un cierto tiempo entre ellas. Este procedimiento puede observarse en la Figura 1.

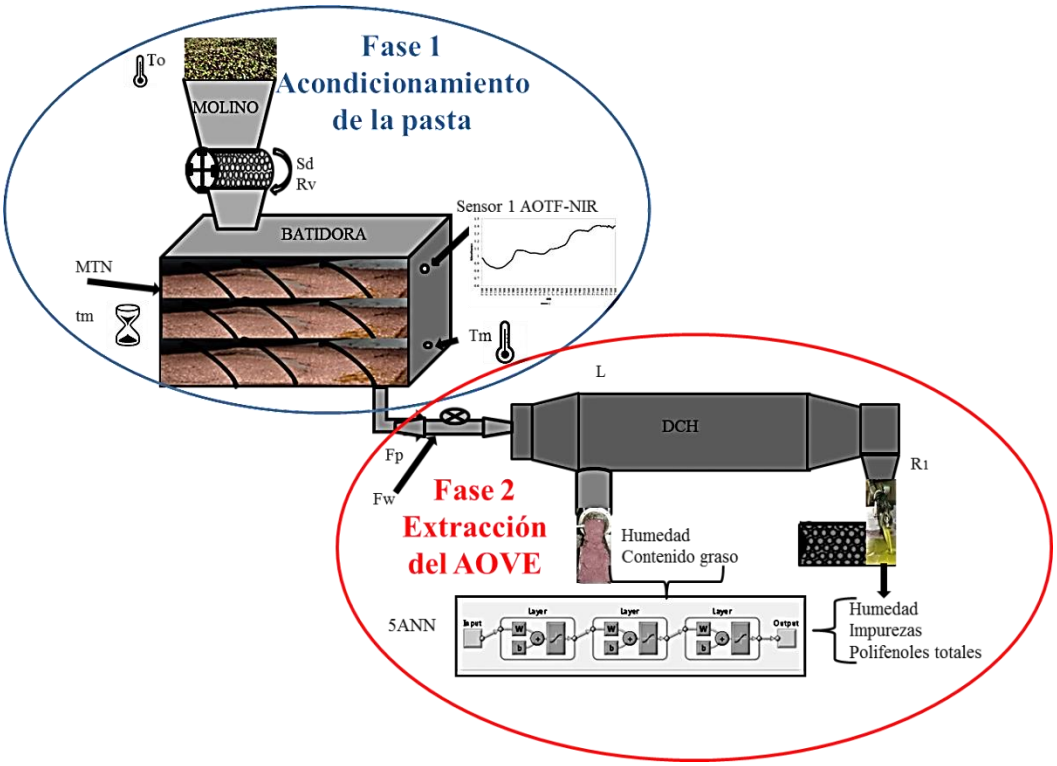


Figura 1. Diagrama esquemático del procedimiento de trabajo

2.2. *Muestras espectrales*

La adquisición de los espectros se llevó a cabo mediante un sensor situado a mitad del primer cuerpo de la batidora como indica la Fig. 1. Este sensor conectado a un sistema Acousto-Optical Tunable Filters-Near (AOTF-NIR) Luminar 5030 (Brimrose Cor. USA), está controlado por ordenador. En trabajos previos se llevó a cabo optimizó el lugar de implantación del sensor, la forma de obtención de los espectros (por triplicado con una diferencia de 5 minutos entre uno), así como los tratamientos a realizar a los mismos(Allouche et al., 2015; Jiménez et al., 2008; Jiménez Marquez et al., 2009). El tratamiento espectral aplicado a los espectros recogidos fue el descrito en el trabajo anterior (reducción de rango espectral de 1100 a 2150nm), PCA (eliminación de espectros anómalos) mediante Hotelling-T^2. En este tratamiento espectral fue realizado en el programa 'The Unscrambler 9.7'(Camo, Oslo) y completado posteriormente aplicando the 'Savitzky-Golay' first derivative (three smoothing points) a través del programa de Matlab. Los puntos espectrales tras este tratamiento fueron

reducidos a 39 (Gorry, 1990). Las muestras espectrales de masa de aceituna y su tratamiento fueron utilizadas en este trabajo y en el anterior.

2.3. *Muestras analíticas*

Tal y como se ha indicado anteriormente al final de la etapa extracción de cada ensayo, a la salida del DCH, se recogieron tres replicas de orujo y tres replicas de 250ml de mosto oleoso antes del tamiz vibratorio. Las muestras de orujo corresponden con las analizadas anteriormente en la modelización del proceso global.

A las muestras de mosto oleoso se le determinó el contenido de humedad e impurezas de acuerdo a los métodos oficiales(ISO 662:2016, 2016; ISO 663:2007, 2007) y cuyos resultados se expresaron en wt %. Adicionalmente, el contenido de fenoles totales fue determinado en las muestras sin filtrar usando el método Folin- Ciocalteau reagent y medido en absorbancia a 725nm (Vázquez-Roncero A. et al., 1973). Los resultados fueron expresados en mg kg^{-1} de ácido caféico.

2.4. *Redes neuronales artificiales*

Las redes neuronales artificiales se fundamentan en la funcionalidad de la neurona biológica y en la analogía matemática que consisten de un gran número de sistemas relativamente simples, que funcionan en paralelo para tomar decisiones rápidamente. Tales sistemas conocidos como nodos son conectados por medio de sinapsis artificiales, simbolizadas por una matriz de números, los cuales pueden ser ajustados por medio de un proceso de aprendizaje (Aldrich y Slater, 1995; Thyagagaranjan et al., 1998).

Para la modelización utilizando redes neuronales se construyó una red de tipo recurrente ya que el proceso de elaboración del AOV depende del tiempo y de la variabilidad de la materia prima derivada del mismo.

Cada red tiene un único nodo en la capa de salida, diseñando por lo tanto cinco redes con diferentes datos de salida como se observa en la Figura 2.

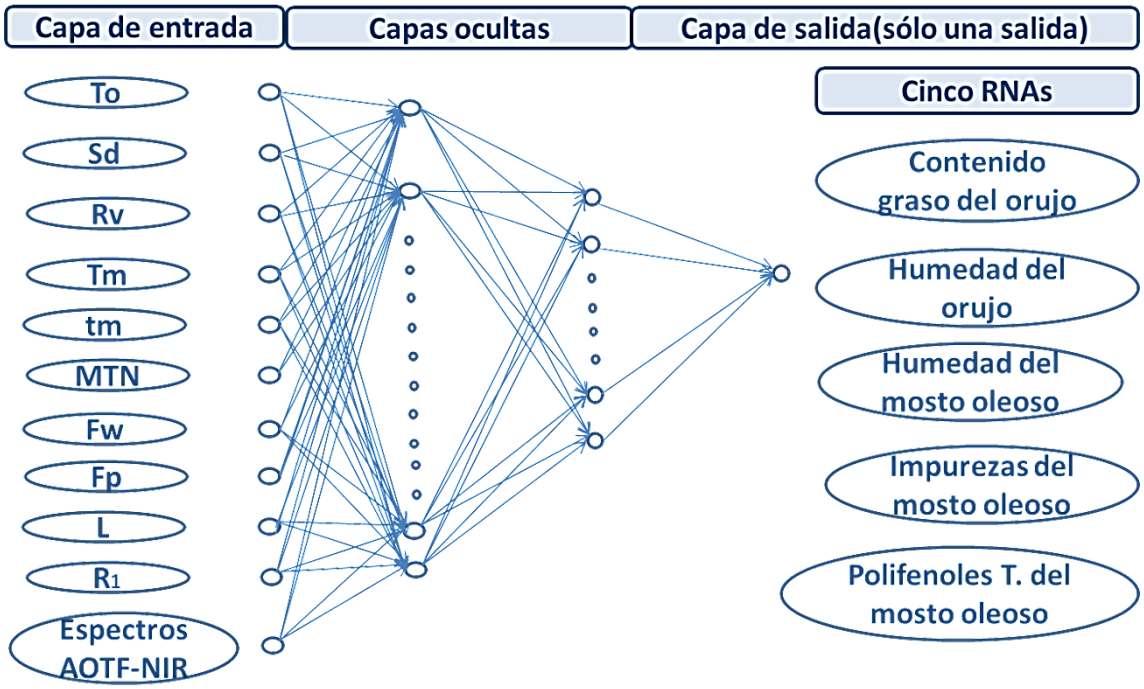


Figura 2. Esquema de la topología de las redes diseñadas

Se obtuvieron 693 datos correspondientes a los diferentes ensayos sometidos a distintas condiciones de proceso durante cuatro años. De estos datos se usaron para el aprendizaje de la red 462 correspondientes a la primera y tercera réplica de muestras recogidas. A través de este aprendizaje la red neuronal modifica sus pesos en respuesta a una información de entrada y elimina, modifica o crea nuevas conexiones entre las neuronas. Esta nueva conexión implica un cambio de peso 'Wij' buscando que sea diferente de cero y que el error entre el valor de salida de la red y el de referencia sea mínimo. Para ello se recurrió al algoritmo de aprendizaje para redes recurrentes "feed-forward-back-propagation" (Zell et al., 1995). La retropropagación consiste en propagar el error hacia atrás durante el entrenamiento, es decir, de la capa de salida hacia la capa de entrada, pasando por las capas ocultas. La transmisión de información entre neuronas de una capa a otra se realizó a través de funciones de transferencia 'tansig', 'logsig' y 'purelin'. Para entrenar las redes diferentes funciones (trainrp, 'trainlm' y 'traingda') fueron probadas. Simultáneamente al aprendizaje se realizó la validación con los datos restantes (231).

La arquitectura de las redes fue definida determinándose el número de capas internas y el número de neuronas en cada capa(Zell et al., 1995), que estarán conectadas con las neuronas de la capa de entrada y a su vez con la de la capa de salida de forma

recurrente. El número de neuronas de las capas ocultas debe ser lo suficientemente grande como para que se forme una región compleja que pueda resolver el problema, sin embargo no debe ser muy grande, pues las regiones de decisión se limitarían solo a los ejemplos de entrenamiento. La tipología óptima se determinó analizando los valores de los errores de validación a medida que el número de neuronas se incrementaba para una y para dos capas internas. La red elegida cumplía con los siguientes requisitos: error cuadrático de predicción (RMSEP) mínimo y coeficiente de correlación (r) entre los datos experimentales reales y los estimados por la red máximo. Una vez definida la tipología de la red, se construyó una curva de validación, determinándose el número de iteraciones mínimas para lo cual el error cuadrado medio de validación era mínimo, oscilando entre 50-1000.

2.5. *Calidad y análisis estadístico de las redes*

Para comprobar la calidad de los modelos neuronales diseñados se calcularon los indicadores de calidad (RPD y RER). Valores de RPD (Residual Predictive Deviation), ratio entre la desviación estándar y el error de predicción superiores a 3 indican una excelente predicción para propósitos analíticos, para análisis cuantitativos valores de 2.5-3 y para análisis cualitativos 2.5–2(Williams and Sobering, 1996, 1993). Valores de RER (Relative Error Range) que es el cociente entre el rango de validación y RMSEP, superiores a 10 indican que la red tiene una buena calibración para ser usada en control de calidad de productos alimentarios (Williams and Sobering, 1996, 1993).

A cada modelo neuronal se le aplicó una validación externa con datos (84) obtenidos en otro año diferente para comprobar el funcionamiento del modelo. Para determinar la existencia de diferencias significativas entre los valores predichos por la red neuronal y los valores reales obtenidos en laboratorio se realizó un t_e-Student con un intervalo de confianza del 95% a los datos obtenidos en esta validación externa.

3. Resultados y discusión

3.1. *Inputs*

El proceso de obtención del aceite de oliva es un proceso complejo debido a la falta de linealidad entre las variables y los objetivos, a la diversidad y naturaleza cambiante del fruto y a la falta de regulación de las variables en base al fruto. Por ello en este estudio se han tenido en cuenta las variables mecánicas y tecnológicas y las propias inherentes del fruto utilizadas como inputs, como puede observarse en la Tabla 1. Estas variables junto con los datos espectrales obtenidos a partir de los espectros NIR de la pasta de aceituna conforman los inputs. Por su gran influencia en las fases de acondicionamiento de la pasta y extracción fueron consideradas estas variables.

Tabla 1. Rangos de variación de las variables usadas como inputs en la creación de la redes.

Variables	**Parámetros**	**Abreviación**	**Rango valores (Min-max)[1]**
Mecánicas	Grado de molienda (mm)	Sd	4-7
	Revoluciones de molino (rpm)	Rv	2000-3000
	Punto de descarga de la masa en el DCH (mm)	L	98-100
	Posición punto de descarga del aceite del DCH (mm)	R_1	0-27.5
Tecnológicas	Temperatura de la aceituna (°C)	To	2.5-22.8
	Temperatura de la pasta (°C)	Tm	9-36.7
	Tiempo de batido (minutos)	tm	35-175
	Adición de MTN (%)	MTN	0-1
	Adición de agua de dilución de masa (L/h)	Fw	0-200
	Caudal de alimentación al DCH (kg/h)	Fp	460-1300

[1] n =693 para la construcción de las RNA

La adecuada realización de cada fase influye en el rendimiento final del proceso y en las características finales de los aceites elaborados. El número de vueltas de giro (Rv) y el grado de criba (Sd) del molino son los factores fundamentales de regulación dentro de la fase de preparación de la pasta. Estos factores vienen marcados de acuerdo con el tipo de aceituna (variedad, índice de madurez o estado sanitario fundamentalmente)(Beltrán G., Uceda M., Jiménez A., 2003; Di-Giovacchino et al., 2002; Jiménez A., Hermoso, M., Uceda, 1995) . De igual forma, la temperatura de la pasta (T_m) y el tiempo de batido (t_m), así como la adición de coadyuvantes tecnológicos (MTN) son tres variables dentro de la preparación de la pasta que afectan a la extractabilidad de la misma derivando en los rendimientos del proceso así como la calidad de los aceites a obtener (Beltrán et al., 2010a; Inarejos-García et al., 2011). En la segunda etapa del proceso, la extracción del AOVE viene influenciada por las características de la pasta. El contenido

de humedad de la pasta determina la adición de agua a la misma (Fw). Esta adicción junto con el ritmo de inyección de la pasta (Fp) deben ser lo más continuo y homogéneo posible, ya que modifican los equilibrios de repartición de los polifenoles entre el agua y el aceite favoreciendo su traspaso a la fase acuosa por su naturaleza hidrofilia(Jiménez A., Hermoso, M., Uceda, 1995), además de la formación de los anillos de centrifugación de la pasta y del aceite que se forman en el interior del DCH. Junto a las variables anteriores se ha considerado las variables mecánicas (L y R_1) correspondientes a las características constructivas del DCH. El tubo de alimentación al decanter (L) que varía de acuerdo con el tipo de DCH a utilizar (2 o 3 fases) y el punto de salida de la fase oleosa (R_1) que viene regulado por diafragmas, determinan el grado de clarificación del aceite, y con ello las pérdidas de aceite en el orujo y la cantidad de impurezas con la que sale el mosto oleoso(Di-Giovacchino et al., 2002; Jiménez A., Hermoso, M., Uceda, 1995; Uceda et al., 2008). De esta manera el modelo creado puede emplearse para cualquier DCH independientemente de las características constructivas del mismo y del sistema de extracción a utilizar. La regulación de estas variables implica una corta parada del DCH y de los demás equipamientos, aunque existen ya algunas soluciones comerciales que permiten esta modificación en continuo. Adicionalmente se han introducido en los inputs los datos espectrales de la pasta de aceituna, una vez tratados para su incorporación al proceso de diseño de los modelos.

3.2. *Outputs*

Los outputs considerados fueron las características del orujo y las variables cualitativas del mosto oleoso, reflejadas en la Tabla 2.

Tabla 2. Rangos de los parámetros considerados para la extractabilidad en orujo y del mosto oleoso obtenidos por métodos de referencia.

		Datos entrenamiento[1]		**Datos validación[2]**	
Objetivos (Productos)	**Parámetros**	**Rango (min-max)**	**SD**	**Rango(min-max)**	**SD**
Extractabilidad	Contenido graso (%)	1.66-5.89	0.72	2.15-5.92	0.7
(orujo)	Humedad (%)	51.57-63.47	3.52	56.98-75.42	3.48
Características	Humedad (%)	0.7-52.11	8.76	0.6-51.9	8.63
mosto oleoso	Impurezas (%)	0.03-14.56	1.92	0.03-12.72	1.88
	Polifenoles T. (mg/kg)	135-7227	1020	169-5577	966

[1]n=462; [2]n=231

En dicha tabla se aprecia como han variado los parámetros a lo largo del periodo de estudio. Estas variaciones fueron debidas, en primer lugar a las características originales del fruto y en segundo lugar a la influencia que ha tenido el proceso sobre ellas. Además de las características del orujo que determinan el rendimiento del proceso y las pérdidas de aceite que se puedan producir en el mismo, la cantidad de impurezas y de humedad del mosto oleoso puede relacionarse con la cantidad de aceite perdido en el orujo y a su vez el contenido de fenoles(Jiménez Marquez et al., 2009). Por ello es necesaria una regulación de todas las variables para conseguir la máxima calidad y cantidad de aceite.

3.3. *Modelos neuronales para predecir la extractabilidad del proceso a través de las características del orujo.*

Para la modelización de estas fases del proceso de elaboración de AOV es necesario tener en cuenta las características del orujo junto con las del mosto oleoso para evaluar el proceso. En este caso el diseño de las redes neuronales que predicen la extractabilidad del proceso a través del contenido graso y de humedad del orujo fueron determinadas en el capítulo anterior. En su diseño participaron los mismos datos de inputs, tanto variables como datos espectrales para el entrenamiento 462 y para la validación 231. Para el contenido graso, la topología óptima elegida fue de dos capas ocultas con 57 y 5 neuronas respectivamente. Para transferir la información se usaron las siguientes funciones: tangencial ‘Tansig’ para Input-Hidden, Hidden-Hidden y linear ‘Purelin’ para Hidden-Output. En el caso del contenido de humedad se diseñó una red con 83neuronas en la primera capa oculta y 16 en la segunda, aunque en este caso las funciones de transferencia utilizadas fueron las tres iguales, ‘Trainrp’. Para llevar a cabo un correcto entrenamiento se utilizó la función ‘Trainrp’ (Resilient Backpropagation training) de acuerdo al tipo de red elegida. Para ambos casos, con 185 iteraciones se obtuvo la máxima correlación entre los datos reales de referencia y los estimados por los modelos del orden de 0.90 con mínimos errores de predicción de 0.31% y 1.56% para el contenido graso y de humedad, respectivamente.

En relación a la calidad de las redes diseñadas, para ambos casos, el indicador RDP fue inferior al óptimo 3. Sin embargo, se consiguieron valores de RER>10, de 12.16 y 11.84 para el contenido graso y la humedad, respectivamente.

Tras la realización del test estadístico t_e-Student, se determinó la inexistencia de diferencias significativas entre los valores reales obtenidos en el laboratorio bajo los métodos de referencia y los predichos o estimados por los modelos neuronales para un 95%. En base a los indicadores de calidad y al test estadístico se puede afirmar la potencia de los modelos neuronales desarrollados para tal fin.

Como se indicó en el capítulo anterior, varios son los autores que obtuvieron similares resultados mediante técnicas NIR at-line (Garcia, J.A., Hermoso, M., Cáceres, 1996; García-Sánchez et al., 2005), in-line(Muik et al., 2004) y on-line (Jiménez et al., 2008).

3.4. *Modelos neuronales para la predicción las características del mosto oleoso.*

Tres redes neuronales artificiales fueron creadas en este caso, cada una con distinta salida pero con igual inputs. Para encontrar la óptima topología, el número de neuronas en las capa internas fue variando de 2 en 2 hasta alcanzar el error cuadrático medio menor. Se comprobaron redes con una y dos capas internas. Así mismo, se comprobó distintos tipos de funciones de transferencia y entrenamiento y el número de iteraciones para aprendizaje escogidas aleatoriamente igual a 1000 (Biswajit Sarkar, Sunando DasGupta, 2009). Como comportamiento característico, el error de aprendizaje y validación disminuyen a medida que el número de iteraciones aumenta, aunque llega un momento en el que se obtiene un mínimo valor del error cuadrático medio cuando alcanza 185 iteraciones alcanza. Un entrenamiento con número de iteraciones superior a este significa la incorporación de ruidos en el modelo, perdiendo así su característica de filtración, además de necesitar mayor tiempo y esfuerzo computacional.

Tabla 3. Arquitectura y topología optima de las redes par alas características de mosto oleoso.

Característica/ Configuración RNA	Humedad (%)	Impurezas (%)	Polifenoles T. (mg/kg)
Tipo de red	Back-propagation	Back-propagation	Back-propagation
Función de transferencia entre capa entrada-capa oculta	Tan-sigmoidal (Tsg)	Tan-sigmoidal (Tsg)	Tan-sigmoidal (Tsg)
Función de transferencia entre capas ocultas	Tan-sigmoidal (Tsg)	Tan-sigmoidal (Tsg)	Tan-sigmoidal (Tsg)
Función de transferencia entre capa oculta -capa salida	Tan-sigmoidal (Tsg)	Tan-sigmoidal (Tsg)	Tan-sigmoidal (Tsg)
Ciclos de entrenamiento (Iteraciones)	185	185	185
Función de entrenamiento	Resilient Backpropagation(Trp)	Resilient Backpropagation(Trp)	Resilient Backpropagation(Trp)
Datos para entrenamiento	462	462	462
Datos para validación	231	231	231
Número de neuronas por capa	53/26/1	79/37/1	41/7/1
Criterio de parada	min'RMSEP'/max 'r'	min'RMSEP'/max 'r'	min'RMSEP'/max 'r'
Correlación (r) of validación	0.97	0.93	0.94
Error de predicción(RMSEP)	2.05	0.68	335
Desviación residual predictiva (RPD)	4.21	2.76	2.86
Rango de error relativo (RER)	25.04	18.66	16.00

En la Tabla 3 se observa las principales características de las redes creadas así como los resultados de correlación y errores obtenidos por las mismas. Después de diferentes combinaciones, el número óptimo de neuronas por capa fue de 53/26/1 para el contenido de humedad, 79/37/1 para el contenido de impurezas y 41/7/1 para polifenoles. Las correlaciones conseguidas entre los datos reales y los estimados fueron del orden de 0.97, 0.93 y 0.94 para el contenido de humedad, impurezas y polifenoles totales. En la Figura 3 puede corroborarse estos datos con las regresiones entre ambos datos.

Los indicadores de calidad de los modelos predictivos en su entrenamiento y validación interna, solamente, para el contenido de humedad obtuvo valores de RPD superiores al recomendado 3, quedándose los restantes modelos en valores 2.76 y 2.86 para las impurezas y de los polifenoles, respectivamente. Estos valores de RPD fueron muy cercanos a 3, por lo que podrían considerarse como modelos de calidad. Aunque, teniendo en cuenta, el otro indicador RER, todos los modelos superaron con amplitud el valor óptimo de 10(Williams and Cordeiro, 1985; Williams and Sobering, 1996, 1993). Estos parámetros indican la calidad de las predicciones que ofrecen los modelos neuronales.

No obstante, se corroboró estos indicadores poniendo a prueba las modelos con datos desconocidos por las mismas, correspondientes a otro año de estudio. En la Tabla 4 se observa cinco ejemplos de los resultados obtenidos en las predicciones así como los inputs y outputs utilizados. Los espectros de pasta de aceituna considerados como inputs modificados en su línea base, se aprecian en la Figura 4.

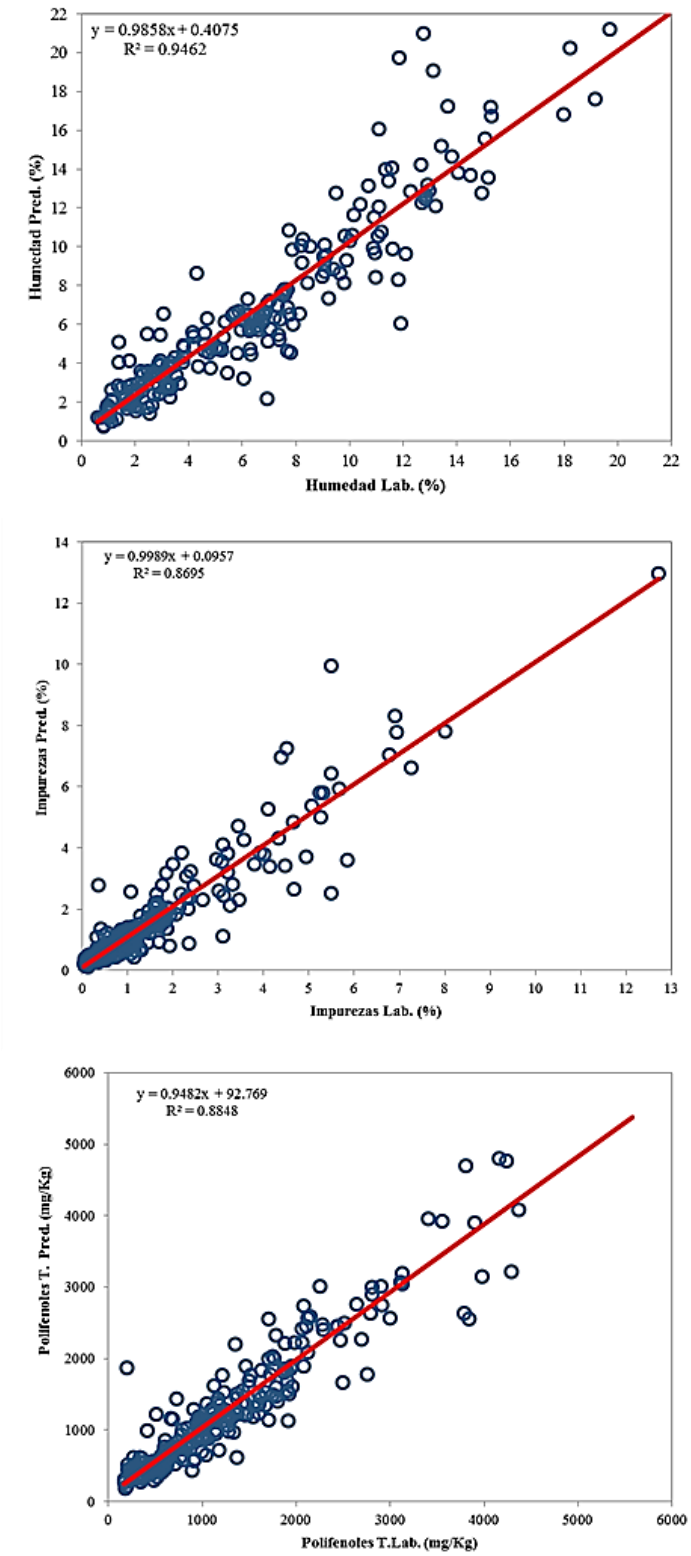


Figura 3. Análisis de la regresión entre los datos reales obtenidos en laboratorio y los datos estimados por las redes para los tres parámetros del mosto oleoso.

Tabla 4. Parámetros de proceso usados en la validación externa de las redes neuronales del mosto oleoso.

Variables del proceso										Parámetros del mosto oleoso								
Acondicionamiento de la pasta						Extracción del AOVE				Humedad (%)			Impurezas (%)			Polifenoles T.(mg/kg)		
To	Sd	Rv	MTN	Tm	tm	Fw	Fp	L	R_1	Real	RNA	%E	Real	RNA	%E	Real	RNA	%E
10	4	2200	0	24.3	69	60	910	98	0	59.8	60.86	1.77	0.41	0.39	4.98	608	715	17.60
9.3	5	2200	0	14.8	127	27.2	905	98	0	61.04	61.75	1.16	0.50	0.43	14.78	633	700	10.58
13.6	6	1800	0	21.3	88	157	950	98	0	62.17	62.45	0.45	0.24	0.25	6.15	756	787	4.10
12.2	7	2000	0	28	79	54	1000	98	0	63.95	61.90	3.21	0.34	0.36	6.31	176	172	2.27
15.4	7	2000	0	30.4	134	32	1000	98	0	60.48	60.29	0.31	0.37	0.33	10.44	204	220	7.84

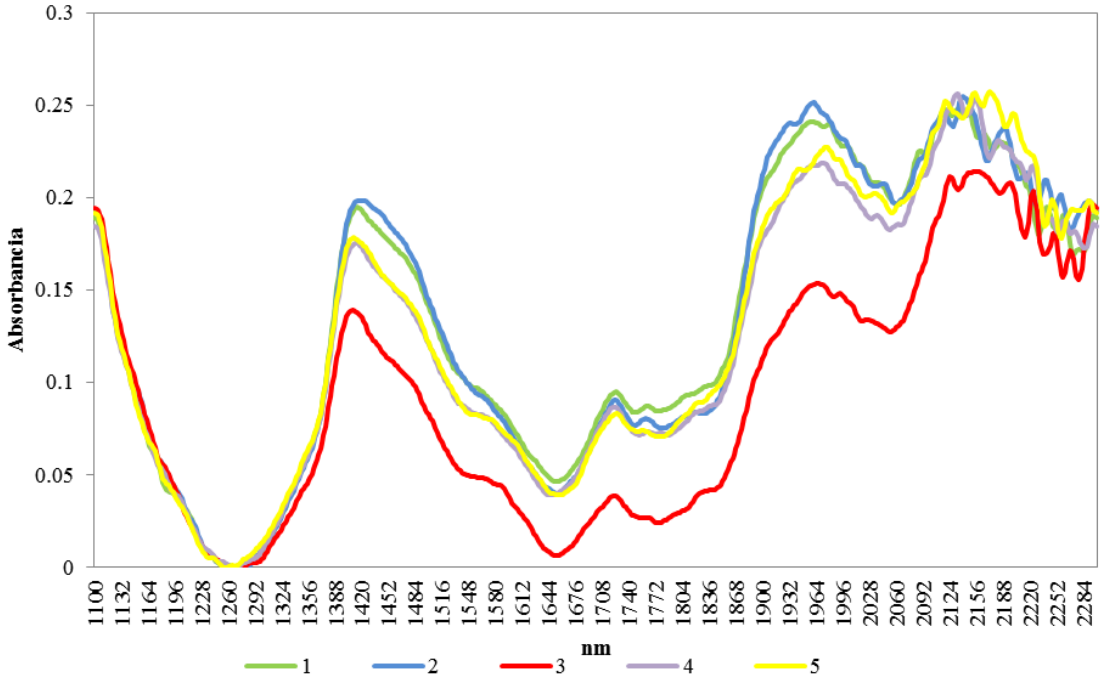


Figura.4. Ejemplos de espectros NIR de la pasta de aceituna recogidos en el primer cuerpo de la batidora.

Como indica la Tabla 4, aún con diferentes valores en las variables de entrada y los diferentes espectros de masa, las redes neuronales responden de forma correcta, aportando buenas predicciones como lo indican los mínimos porcentajes de error. En el caso de del contenido de los polifenoles es donde se observa un error ligeramente superior a los demás, aunque teniendo en cuenta que son muestras sin filtrar y se miden en mg/kg son porcentajes admisibles.

Adicionalmente, la Figura 5 muestra la monitorización de los tres parámetros durante la validación externa ordenados por datos muestrales. Como puede observarse los datos predicativos siguen una curva similar a los reales. Para analizar las varianzas de estos valores externos se realizó un t_e-Student, no encontrando diferencias significativas entre los valores reales y predichos no fueron encontradas. Los valores de p en dicho test fueron superiores a 0.05. Estos resultados indican la alta capacidad predictiva de los modelos creados para los parámetros del mosto oleoso y la robustez y calidad de los datos predichos.

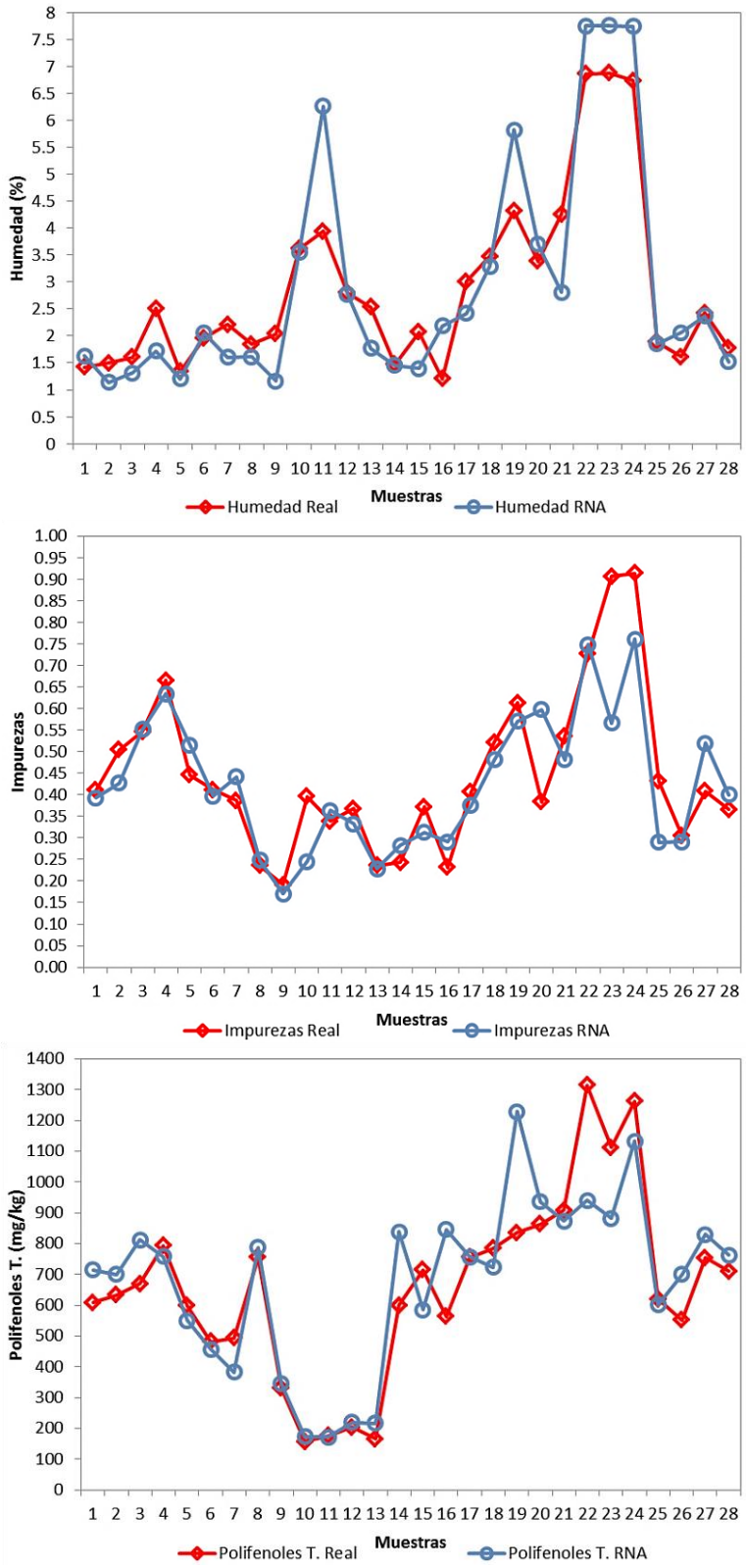


Figura 5. Una comparación entre los datos reales y los datos estimados por las redes para cada parámetro.

No hay muchos estudios a esta fecha con predicciones on-line de características del mosto oleoso a partir de pasta de aceituna en condiciones dinámicas. No obstante, estos

resultados pueden ser comparados con el estudio realizado anteriormente (Jiménez Marquez et al., 2009), en el cual se desarrollo una red neuronal artificial para la estimación del contenido de humedad en el mosto oleoso obteniendo buena correlación entre los datos reales y los estimados de r: 0.98 y un RMSEP: 0.04%. Aunque para ello no se utilizó la tecnología NIR. Para la determinación del contenido de impurezas del mosto oleoso no se encontraron trabajos previos que sirvan de referencia. Por otra parte, hay estudios en los que se han evaluado el contenido de polifenoles en el aceite de oliva pero en diferentes estados. Valores similares de R^2: 0.89 aunque con errores de predicción muy inferiores, RMSEP de 58.67mgkg^{-1} fueron obtenidos mediante el uso de la tecnología NIR(Mailer, 2004). Este hecho se explica al alto número de datos con gran variabilidad entre ellos que fueron procesados en este estudio. En otro trabajo, se obtuvieron valores de R^2 y RMSEP 0.74 y 45.26 mgkg^{-1} respectivamente. Sin embargo estos resultados no son relevantes debido a que el aceite de oliva usado para la determinación de los polifenoles estaba embotellado(Uncu and Ozen, 2015).

En un ensayo previo a este trabajo realizado por este grupo de investigación, se consiguió para la estimación de fenoles un valor de r^2 muy similar aunque con un error inferior por poseer menor variabilidad entre sus datos (Allouche et al., 2015). No obstante habría que considerar que aceite de oliva utilizado fue extraído off-line a escala de laboratorio en un sistema Abencor.

4 Conclusiones

De acuerdo a los resultados obtenidos, se puede concluir que los modelos predictivos basado en RNA diseñados poseen una excelente capacidad predictiva de las características del mosto oleoso a su salida del DCH, así como del orujo. El empleo de las redes neuronales junto con el sistema AOTF-NIR contribuye de forma eficaz en la predicción de las características del producto final simulando de forma precisa las fases de preparación de la pasta y extracción del aceite. Debido a la complejidad del proceso, la inteligencia artificial puede convertirse en un instrumento de apoyo a la optimización y modelización de cada fase de forma que pueda ser utilizado independiente del sistema de extracción y de las características mecánicas del DCH.

Además, estas predicciones pueden incorporarse a un posible sistema de control retroalimentado (SCR) con caracterizaciones ‘on-line’ de los parámetros objetos de estudio. De tal forma que se pueda optimizar el proceso para conseguir la máxima cantidad de aceite a obtener con la mayor calidad y estabilidad a través de sus antioxidantes naturales. Así mismo a través de dicha información ‘on-line’ se podrá regular y mejorar la clarificación del mosto oleoso ya sea mediante decantación natural o mediante CV.

Referencias

Aguilera, M.P., Jiménez, A., Beltrán, G., 2010. Condiciones de batido de la pasta de aceiteuna en frutos Picual de recolección temprana. *Vida Rural* 32–35.

Allouche, Y., Funes López, E., Maza, G.B., Márquez, A.J., 2015. Near infrared spectroscopy and artificial neural network to characterise olive fruit and oil online for process optimisation. *J. Near Infrared Spectrosc.* **23**, 111–121. doi:10.1255/jnirs.1155

Aroca-Santos, R., Cancilla, J.C., Matute, G., Torrecilla, J.S., 2015. Identifying and Quantifying Adulterants in Extra Virgin Olive Oil of the Picual Varietal by Absorption Spectroscopy and Nonlinear Modeling. *J. Agric. Food Chem.* **63**, 5646–52. doi:10.1021/acs.jafc.5b01700

Beltrán, G., Aguilera, M.P., Allouche, Y., Jiménez, A., 2010. Efectos de la molienda del fruto sobre el rendimiento industrial del proceso y la calidad del aceite. *Vida Rural* 28–31.

Beltrán G., Uceda M., Jiménez A., A.M., 2003. Olive oil extractability index as a parameter for olive cultivar characterization. *J. Sci. Food Agric.* **83**, 503–506.

Bendini, A., Cerretani, L., Di Virgilio, F., Belloni, P., Lercker, G., Toschi, T.G., 2007. In-process monitoring in industrial olive mill by means of FT-NIR. *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **109**, 498–504. doi:10.1002/ejlt.200700001

Biswajit Sarkar, Sunando DasGupta, S. De, 2009. Application of external electric field to enhance the permeate flux during micellar enhanced ultrafiltration. *Sep. Purif. Technol.* **66**, 263–272.

Cárdenas, R., Marcos, J., 2013. Cap. 4.Proceso de extracción de aceite de oliva, in: Ibérica, G.W.S. (Ed.), El Manual Del Maestro de Almazara. Andújar (Jaén), pp. 88–143.

Clodoveo, M.L., 2012. Malaxation: Influence on virgin olive oil quality. Past, present and future. An overview. *Trends Food Sci. Technol.* **25**, 13–23.

Di-Giovacchino, L., Sestili, S., Di-Vincenzo, D., 2002. Influence of olive processing on virgin olive oil quality. *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **104**, 587–601.

Faria, S., Rodrigues, C.A., Nunes, R., dos Santos, R.M., 2015. Evaluation of extra virgin olive oil stability by artificial neural network. *Food Chem.* **179**, 35–43.

Funes, E., Allouche, Y., Beltrán, G., Jiménez, A., 2015. A Review: Artificial Neural Networks as Tool for Control Food Industry Process. *J. Sens. Technol.* **5**, 28–43. doi:10.4236/jst.2015.51004

Furferi, R., Governi, L., Volpe, Y., 2010. ANN-based method for olive Ripening Index automatic prediction. *J. Food Eng.* **101**, 318–328. doi:10.1016/j.jfoodeng.2010.07.016

Furferi, R., Carfagni, M., Daou, M., 2008. Real-time estimation of peroxides and acidity level of extra-virgin olive oil: an integrated approach. *Int. J. Math. Comput. Simul.* **2**.

Furferi, R., Carfagni, M., Daou, M., 2007. Artificial neural network software for real-time estimation of olive oil qualitative parameters during continuous extraction. *Comput. Electron. Agric.* **55**, 115–131. doi:10.1016/j.compag.2006.12.006

Garcia, J.A., Hermoso, M., Cáceres, P., 1996. Determination of oil and moisture in two-phases olive-pomace by using near-infreared spectroscopy. *Grasas y Aceites* **47**, 317–322.

García-Sánchez, A., Ramos Martos, N., Ballesteros, E., 2005. Estudio comparativo de distintas técnicas analíticas (espectroscopía de NIR y extracción mediante Soxhlet) para la determinación del contenido graso y de humedad en aceitunas y orujo de Jaén. *Grasas y Aceites* **56**, 220–227.

Gökmen, V., Açar, Ö.C., Serpen, A., Sügüt, I., 2009. Modeling dead-end ultrafiltration of apple juice using artificial neural network. *J. Food Process Eng.* **32**, 248–264.

Gonçalves, E.C., Minim, L.A., Coimbra, J.S.R., Minim, V.P.R., 2005. Modeling sterilization process of canned foods using artificial neural networks. *Chem. Eng. Process.* **44**, 1269–1276.

Gorry, P.A., 1990. General least-squares smoothing and differentiation by the convolution (Savitzky-Golay) method. *Anal. Chim. Acta* **62**, 570–573.

Inarejos-García, A.M., Fregapane, G., Salvador, M.D., 2011. Effect of crushing on olive paste and virgin olive oil minor componenets. *Eur. Food Res. Technol.* **232**, 441–451.

Inarejos-García, A.M., Gómez-Rico, A., Salvador, M.D., Fregapane, G., 2009. Influence of malaxation conditions on virgin oil yield, overall quality and composition. *Eur. Food Res. Technol.* **228**, 671–677.

ISO 662:2016, 2016. Animal and vegetable fats and oils. Determination of moisture and volatile matter content.

ISO 663:2007, 2007. Animal and vegetable fats and oils. Determination of insoluble impurities content.

Jiménez Marquez, A., Aguilera Herrera, M.P., Uceda Ojeda, M., Beltrán Maza, G., 2009. Neural network as tool for virgin olive oil elaboration process optimization. *J. Food Eng.* **95**, 135–141. doi:10.1016/j.jfoodeng.2009.04.021

Jiménez, A., Beltrán, G., Aguilera, M.P., Uceda, M., 2008. A sensor-software based on artificial neural network for the optimization of olive oil elaboration process. *Sensors Actuators, B Chem.* **129**, 985–990. doi:10.1016/j.snb.2007.09.030

Jiménez, A., Molina, A., Pascual, M.I., 2005. Using optical NIR sensor for on-line virgin olive oils characterization. *Sensors Actuators, B Chem.* **107**, 64–68. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.snb.2004.11.103

Jiménez, A., Hermoso, M., Uceda, M., 1995. Elaboración del aceite de oliva virgen mediante sistema continúo de dos fases. Influencia de diferentes variables del proceso en algunos parámetros relacionados con la calidad del aceite. *Grasas y Aceites* **46**, 299–303.

Mailer, R.J., 2004. Rapid evaluation of olive oil quality by NIR reflectance spectroscopy. *J. Am. Oil Chem. Soc.* **81**, 823–827. doi:http://dx.doi.org/10.1007/s11746-004-0986-4

Molto-Garcia, E., Blasco-Piquer, M., Aparicio-López, R., 2003. Desarrollo de sensores para la evaluación de la calidad del aceite de oliva. *Agrícola vergel Frutic. Hortic. Floric.* **253**, 32.

Movagharnejad, K., Nikzad, M., 2007. Modeling of tomato drying using artificial neural network. *Comput. Electron. Agric.* **59**, 78–85.

Muik, B., Lendl, B., Molina-Díaz, A., Pérez-Villarejo, L., Ayora-Cañada, M.J., 2004. Determination of oil and water content in olive pomace using near infrared and Raman spectrometry. A comparative study. *Anal. Bioanal. Chem.* **379**, 35–41.

Satish, S., Pydi Setty, Y.P., 2005. Modeling of a continuous fluidized bed dryer using artificial neural networks. Int. Commun. *Heat Mass Transf. J.* **32**, 539–547.

Tanajura da Silva, C.E., Filardi, V.L., Pepe, I.M., Chaves, M.A., Santos, C.M.S., 2015. Classification of food vegetable oils by fluorimetry and artificial neural networks. *Food Control* **47**, 86–91. doi:10.1016/j.foodcont.2014.06.030

Torrecilla, J.S., Cancilla, J.C., Matute, G., Díaz-Rodríguez, P., 2013. Neural network models to classify olive oils within the protected denomination of origin framework. *Int. J. Food Sci. Technol*. **48**, 2258–2534.

Uceda, M., Hermoso, M., Aguilera, M.P., 2008. La calidad del aceite de oliva, in: Barranco, D., Fernández-Escobar, R., Rallo, L. (Eds.), El Cultivo Del Olivo. Madrid, pp. 701–726.

Uncu, O., Ozen, B., 2015. Prediction of various chemical parameters of olive oils with Fourier transform infrared spectroscopy. *LWT - Food Sci. Technol.* **63**, 978–984. doi:10.1016/j.lwt.2015.05.002

Vázquez-Roncero A., Janer del Valle C., Janer del Valle M.L., 1973. Determinación de los polifenoles totales del aceite de oliva. *Grasas y Aceites* **24**, 350.

Williams, P.C., Sobering, D.C., 1996. How do we do it: a brief summary of the methods we use in developing near infrared calibrations., in: Davies, A.M.C., Williams, P.C. (Eds.), Near Infrared Spectroscopy: The Future Waves. NIR Publications, Chichester, UK, pp. 185–188.

Williams, P.C., Sobering, D.C., 1993. Comparison of commercial Near-Infrared Transmittance and Reflectance instruments for analysis of whole grains and seeds. *J. Near Infrared Spectrosc.* **1**, 25–32.

Williams, P.C., Cordeiro, H.M., 1985. Effect of calibration practice on correction of errors induced in near-infrared protein testing of hard red spring wheat by growing location and season. *J. Agric. Sci*. **104**.

Zell, A., Mamier, G., Vogt, M., Mache, N., 1995. User manual neural network simulator, version 4. ed. University of Stuttgart, Stuttgart.

Capítulo 3.5. Resultados

Modelos RNA´s predictivos para la optimización de la clarificación del aceite de oliva virgen extra mediante centrifuga vertical

Modelos RNA´s predictivos para la optimización de la clarificación del aceite de oliva virgen extra mediante centrifuga vertical

Abstract

Ocho redes neurales artificiales fueron desarrolladas como modelos predictivos para los parámetros reglados y nutricionales de los aceites obtenidos de la centrifuga vertical. Las redes fueron diseñadas considerando los espectros NIR de mosto oleoso a su salida del decanter centrífugo horizontal y los caudales y temperaturas del aceite y del agua de adición. Los resultados obtenidos en todas las redes diseñadas indicaron una buena capacidad creativa de los modelos neuronales a través de los indicadores de calidad (RER y RPD). Las correlaciones entre los datos reales y los predicativos por las redes estuvieron dentro del rango 0.76-0.99, siendo las redes para la absorción UV (K_{232} yK_{270}) los que dieron correlaciones más bajas. Para los polifenoles, los tocoferoles y los pigmentos de caroteno y clorofila, la prueba externa de validación del t_e-Student hace una predicción fiable de estos parámetros.

Con los modelos predictivos se podrá modelar y regular la centrifuga vertical además de monitorizar en línea, controlar y optimizar la etapa de clarificación dentro del proceso de extracción del aceite de oliva virgen extra.

Keywords: aceite de oliva virgen extra, red neuronal artificial, NIR, centrifuga vertical, modelos predictivos

Abbreviations: **AOTF-NIR,** Acousto-Optical Tunable Filters-Near Infrared; **AOVE,** Aceite de oliva virgen extra; **CV**, Centrifuga vertical; **DCH,** Decanter centrifugo horizontal; $\mathbf{F_{oi}}$, Caudal del aceite a CV; **Fw,** Adición de agua de dilución de la masa; $\mathbf{F_{wi}}$, Caudal del agua a CV; **RER,** Rango de error relativo; **RMSEP,** Raíz del error medio cuadrático de la predicción; **RNA,** red neuronal artificial; **RPD,** Desviación residual predictiva;; $\mathbf{T_{oi}}$, Temperatura del aceite a CV; $\mathbf{T_{wi}}$, Temperatura del agua a CV.

1. Introducción

Para obtener un aceite de oliva de calidad deben respetarse al máximo las cualidades naturales que tiene el zumo del fruto del olivo. Este zumo es obtenido por una serie de tratamientos al que es sometida la aceituna, desde su limpieza y almacenamiento, pasando por la molienda, la separación de las partes sólidas de las líquidas. Mediante la extracción del aceite en sistema continuo de dos fases, el aceite obtenido presenta una cantidad variable de humedad e impurezas que deben ser eliminadas. Este hecho junto con el incremento de las capacidades productivas de las líneas de procesado hace imprescindible la etapa de clarificación que permita una rápida separación de las fases no deseadas con el fin de que el aceite se encuentre en contacto con ellas el menor tiempo posible. La mala ejecución en alguna de estas fases puede afectar a la calidad del aceite y así lo reflejan los parámetros químicos de calidad (Masella *et al.,* 2010). Una clarificación deficiente puede dar lugar a la aparición de fermentaciones no deseadas en los depósitos y al deterioro de las características sensoriales del aceite almacenado (Beltrán *et al.,* 2012).

Para llevar a cabo esta clarificación se añade agua a la centrifuga vertical que trabaja a un régimen de revoluciones de 5000-8000rpm, según tamaño, bajo el principio de la fuerza centrífuga (como se observa en la Fig. 1). Durante el proceso, tienen lugar la separación centrífuga de los sólidos en el aceite, la migración del agua contenida en el aceite hacia el agua de adición a la centrifuga y la difusión de compuestos hidrosolubles presentes en el aceite hacia el agua de proceso.

Estos fenómenos, están relacionados directamente con la regulación de la centrifuga y en la eficiencia de la clarificación del aceite. De esta regulación depende fundamentalmente la calidad del aceite obtenido como pérdida de polifenoles por excesiva adición de agua o pérdida de aromas entre otras por temperaturas elevada del aceite y/o agua de adición (Cert *et al*., 1999; Jiménez *et al.*, 2014; Masella *et al.*, 2009).

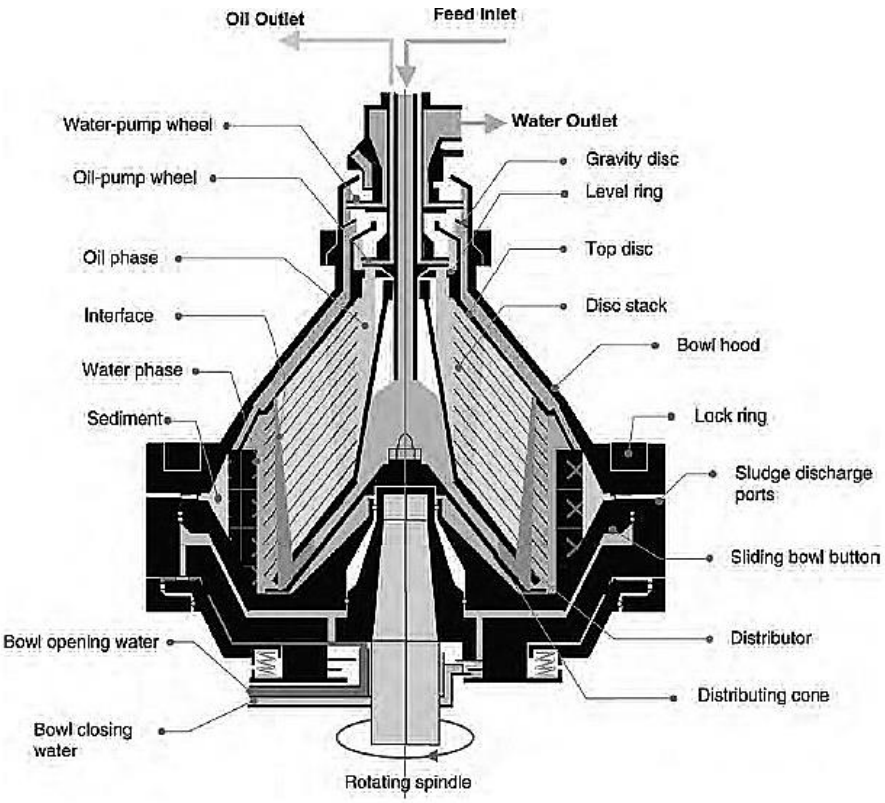


Figura 1. Diagrama de operación de la centrifuga verical

De este modo, el control de los parámetros de centrífuga vertical puede permitir modular las características del aceite de oliva, especialmente aquellos compuestos relacionados con las características sensoriales como compuestos fenoles y volátiles que afectan los coeficientes de reparto de estos compuestos entre las fases oleosa y acuosa (Jiménez *et al.*, 2014, Masella *et al.*, 2009). Abenzoa et al. (2016) describió cómo afectan estos parámetros al desprendimiento de aceite de oliva virgen para aquellos aceites con un sabor amargo demasiado fuerte.

Por ello se hace fundamental el control de la relación aceite: agua bajo determinadas premisas de temperatura que van variando de acuerdo con la temperatura y turbidez con la que entre el aceite en la centrifuga (Jiménez *et al.*, 1995).

Para que las regulaciones pertinentes a realizar en la centrifuga vertical tengan el resultado deseado es necesario conocer con antelación las características del aceite obtenido y controlar así la centrifuga de forma inmediata. Una de las tecnologías innovadoras aplicadas capaz de estimar on-line cualquier parámetro son las redes neuronales artificiales. Se trata de un algoritmo matemático con la capacidad de

relacionar los parámetros de entrada y de salida, entrenando con ejemplos a través de iteraciones sin requerir ninguna relación previa entre las variables del proceso (Faria *et al.*, 2015). Hoy en día hay un aumento de esta aplicación de redes neuronales para resolver problemas complejos. En ocasiones se ha combinado con la tecnología NIR, no destructiva, rápida y sencilla, dando buenos resultados(Allouche *et al.,* 2015) ya que esta tecnología cada vez es más usada en análisis de aceite(Casale and Simonetti, 2014).

El objetivo de este trabajo fue la creación de modelos neuronales que puedan conforman un sistema de control retroalimentado y permitan modelar y controlar la fase de clarificación. Este modelado estuvo basado en las predicciones que aportaban los modelos neuronales de los diferentes parámetros de calidad (acidez, peróxidos, K_{232}, K_{270}) y nutricionales (polifenoles, tocoferoles y pigmentos) del AOVE obtenido.

Con la modelización on-line de la CV se pretende modificar las variables tecnológicas que influyen en esta etapa del proceso y conseguir un AOVE 'premium' con altos valores de nutricionales, producido de manera sostenible mediante el ahorro de agua y energía. Además se disminuyen residuos que están en contacto con los aceites para evitar alteraciones de calidad. A partir de aquí la trazabilidad en bodega por calidades puede realizarse de forma inmediata, realizando un almacenamiento racional basado en las características diferenciales de los aceites.

2. Materiales y métodos

2.1. *Material vegetal y proceso de extracción.*

Este trabajo se desarrollo durante tres campañas consecutivas con aceitunas de la variedad 'Picual' procedente de la finca experimental del Centro IFAPA 'Venta del Llano' en Mengíbar (Jaén). El fruto fue procesado en la almazara experimental de dicho centro. La almazara experimental esta equipada por un sistema continuo de elaboración tal como describe en anteriores trabajos (Allouche *et al.*, 2015; Jiménez *et al.*, 2008). Todo el proceso fue controlado mediante software de automatización Procioleo (Procisa, España) (Jiménez Marquez *et al.*, 2009).

En concreto, la centrifuga vertical utilizada esta formada por una batería de platos tronco cónicos de 59.24mm de altura, 202mm de diámetro base y 48.68º de pendiente

de plato, situando el radio de la interfase en Ri=87mm. La capacidad de trabajo de la CV es de 10m^3/ día a una velocidad de 7500rpm.

En concreto, la centrifuga vertical utilizada esta formada por una batería de platos tronco cónicos de 59.24mm de altura, 202mm de diámetro base y 48.68º de pendiente de plato, situando el radio de la interfase en Ri=87mm. La capacidad de trabajo de la CV es de 10m^3/ día a una velocidad de 7500rpm.

2.2. *Recolección de muestras experimentales*

En este estudio se llevaron a cabo diferentes ensayos en los cuales ensayos las variables tecnológicas que afectan a la etapa de clarificación del mismo se fueron modificando, caudales de aceite y de agua, así como las temperaturas de ambos. Para cada ensayo se recogieron por triplicado muestras espectrales de mosto oleoso y de AOVE a la salida de la CV.

La recolección de muestras espectrales se llevó a cabo mediante sistema AOTF-NIR (Acousto-Optical Tunable Filters-Near Infrared) Luminar 5030 (Brimrose Corp. EEUU). Este equipo estaba conectado mediante fibra óptica a un sensor situado a la salida del decanter centrífugo horizontal antes del tamiz vibratorio. El equipo estaba programado para realizar escaneos con un ratio de 10escaneos s^{-1} en rango espectral de 1100-2500nm a una resolución de 2nm. Las muestras espectrales fueron recogidas con un intervalo de tiempo entre ellas. De tal forma que proporcionaba información instantánea del mosto oleoso que entra en la CV para ser clarificado. En la Figura 2 pueden observarse algunos de los espectros tomados, bajo diferentes condiciones de proceso.

Tras ser clarificado, por cada ensayo se recogieron por triplicado muestras de aceite de oliva a la salida de la centrifuga vertical antes de ser mandado a los depósitos de almacenamiento. Posteriormente las muestras fueron filtradas y almacenadas a -15°C para su posterior análisis químico.

2.3. *Análisis Químico*

Los parámetros regulados (acidez, índice de peróxidos, absorción UV) junto con determinados parámetros de calidad nutricional fueron analizados. El grado de ácidos grasos libres(% ácido oleico), el nivel de peróxidos ($meqO_2kg^{-1}$) y los coeficientes de absorción UV 232nm y270nm fueron determinados de acuerdo con los métodos oficiales del COI(Official Journal European Union, 2014).

La determinación de los polifenoles se realizó por el método descrito por Vázquez-Roncero A. *et al.,* (1973) usando el reactivo Folin-Ciocalteau y midiendo su absorbancia a 725nm obteniendo los $mgkg^{-1}$ de ácido caféico. Para conocer los mg de pigmentos carotenoides y clorofílicos por kg de aceite se utilizó el método Minguez-Mosquera *et al.* (1991) midiendo la absorbancia 470nm y 670nm.

Para la determinación del contenido de tocoferoles ($mgkg^{-1}$) se siguió el método IUPAC 2432 (IUPAC, 1992). Para ello se utilizó un cromatógrafo de líquidos (PerkinElmer) equipado con una bomba isocrática LC200 y un detector UV–vis Lc29. Las concentraciones de tocoferoles se obtuvieron utilizando rectas de calibrado de las soluciones estándar de los patrones α, β y ɣ.

2.4. *Análisis y tratamiento espectral*

Los datos espectrales fueron exportados al programa 'The Unscrambler 9.7' (Camo Inc.) donde se les aplicó un tratamiento espectral conforme a lo descrito por Jiménez et. al.(Jiménez *et al.,* 2008). Con el fin de eliminar los efectos de dispersión no deseable y reducir del número inicial de puntos espectrales, a los espectros se le aplicó la 1ª derivativa Savitzky-Golay (3 smothing points).

2.5. *Redes Neuronales Artificiales*

Las RNAs creadas en este trabajo fueron diseñadas con el software Matlab del tipo perceptrón multicapa también conocido como 'back-propagation'. Las RNA´s

seleccionada fue 'feed-forward' con predicciones horizontales, con aprendizaje supervisado y bajo las premisas utilizadas en trabajos anteriores (Allouche *et al.*, 2015; Jiménez *et al.*, 2008). La Backpropagation es un tipo de red de aprendizaje supervisado, que emplea un ciclo propagación – adaptación de dos fases. Una vez que se ha aplicado un patrón a la entrada de la red como estímulo, este se propaga desde la primera capa a través de las capas superiores de la red, hasta generar una salida. La señal de salida se compara con la salida deseada y se calcula una señal de error para cada una de las salidas. Las salidas de error se propagan hacia atrás, partiendo de la capa de salida, hacia todas las neuronas de la capa oculta que contribuyen directamente a la salida. Sin embargo las neuronas de la capa oculta solo reciben una fracción de la señal total del error, basándose aproximadamente en la contribución relativa que haya aportado cada neurona a la salida original. Este proceso se repite, capa por capa, hasta que todas las neuronas de la red hayan recibido una señal de error que describa su contribución relativa al error total. Basándose en la señal de error percibida, se actualizan los pesos de conexión de cada neurona, para hacer que la red converja hacia un estado que permita clasificar correctamente todos los patrones de entrenamiento.

El número de capas, de neuronas por capa, las funciones de transferencia, el algoritmo de entrenamiento y el número de iteraciones se seleccionaron y analizaron en el entrenamiento sobre la base de un ensayo iterativamente variando de a a b con un paso de x. Para comprobar el correcto funcionamiento de una red se determina el error medio cuadrático de predicción (RMSEP) y el coeficiente de correlación (r) entre los valores de referencia de laboratorio y los valores estimados por la red. Dichos parámetros deben ser mínimo y máximo respectivamente.

$RMSEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_e - y_r)^2}{n-1}}$ $r = \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_e - \overline{y_e})(y_r - \overline{y_r})}{\left[\sum_{i=1}^{n}(y_e - \overline{y_e})^2 (y_r - \overline{y_r})^2\right]^{1/2}}$ siendo y_e los valores estimados y_r los valores reales y *n* el número de muestras de la base de datos. Otro parámetros determinados y ratifican la calidad del modelo fueron los valores de RPD (Residual Predictive Deviation) y RER (Relative Error Range).

$RPD = \frac{SD}{RMSEP}$; $RER = \frac{Rango\ \text{Validación}}{RMSEP}$, siendo SD la desviación estándar de los datos de referencia y Rango Validación, el rango de los valores utilizados en la validación.

Valores de RPD superiores a 3 indican una excelente predicción para propósitos analíticos, para análisis cuantitativos valores de 2.5-3. Una red tiene una buena calibración para ser usada en control de calidad de productos alimentarios cuando el valor de RER es superior a 10(Williams and Sobering, 1996).

Adicionalmente las redes fueron sometidas a una validación externa utilizando los datos correspondientes a una campaña diferente (39datos). A los resultados obtenidos se les aplicó un t_e-Student estadístico con un intervalo de confianza del 95% para determinar la existencia de diferencias significativas entre los valores predichos por las RNA´s y los valores reales obtenidos en laboratorio.

3. Resultados

3.1. *Inputs y outputs*

Para la creación de las RNA que modelan el funcionamiento de la CV fueron necesarios considerar dentro de los inputs los datos espectrales del mosto oleoso y las variables principales que intervienen en esta fase de clarificación. En la Figura 2 pueden observarse como fluctúan los espectros a razón de las características del aceite, sobre todo en función de la humedad y la cantidad de impurezas que contenga.

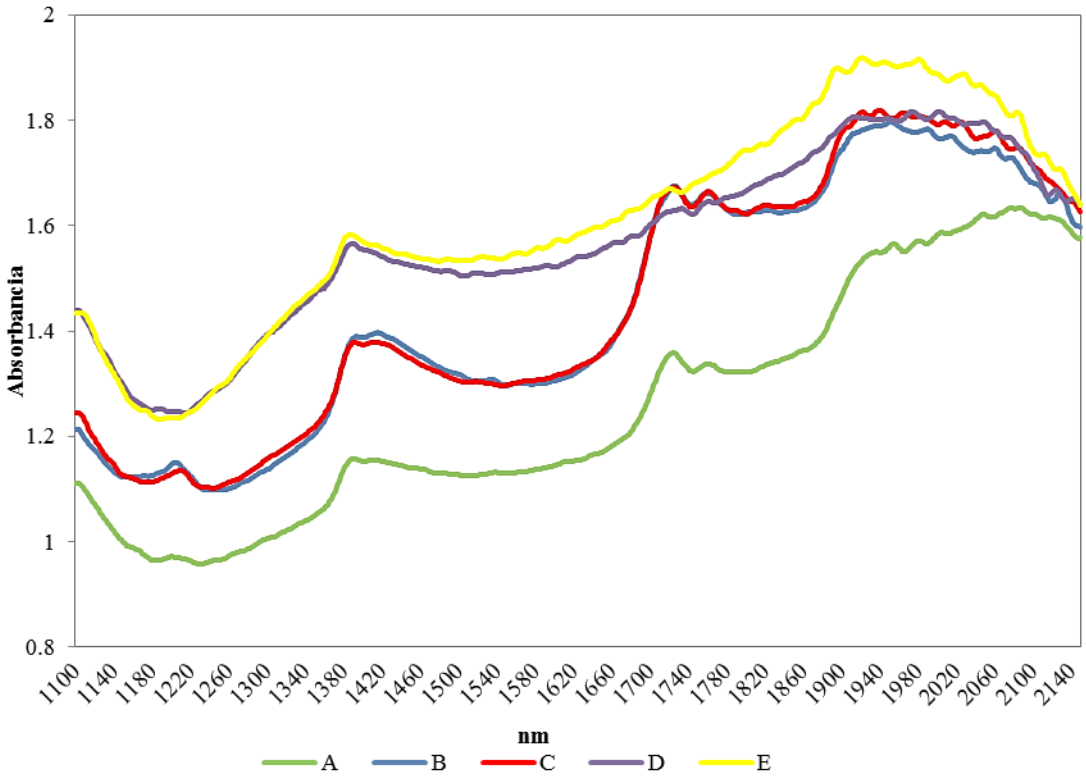


Figura 2. Diferentes espectros de mosto oleoso a la salida del decanter horizontal bajo diferentes condiciones de proceso.

En la Tabla 1 se observan el amplio rango de variación que tuvieron durante los ensayos llevados a cabo durante todos los años del estudio.

Tabla.1. Rangos de las variables tecnológicas usadas para predecir las características del AOV a la salida de la CV.

Variables	**Parámetros**	**Abreviación**	**Rango valores (Min-max)[1]**
A la entrada a VC	Caudal del aceite de entrada a la CV (L/h)	F_{oi}	44-353
	Temperatura del aceite de entrada ala CV (°C)	T_{oi}	13.1-30.6
	Caudal del agua de entrada a la CV (L/h)	F_{wi}	27-656
	Temperatura del agua de entrada a la CV (°C)	T_{wi}	9.3-29.5
A la salida de CV	Caudal de salida del aceite de la CV (L/h)	F_{oo}	44-354
	Temperatura de salida del aceite de la CV (°C)	T_{oo}	10.3-28.1

[1]n=105data

Debido a la incidencia de estas variables sobre las características de los aceites finales fueron usadas como inputs. De sobra es conocida la naturaleza liposoluble de los tocoferoles y carotenos e hidrosoluble de los polifenoles y clorofilas. Por lo tanto la aportación de agua a la CV se convierte en un factor muy importante a controlar, pues

puede producir lavado de dichos parámetros en menor o mayor medida en función de su volumen. Al igual ocurre con la temperatura alcanzada por el aceite, en exceso puede degradar estos compuestos. Por ello hay que controlar las temperaturas de entrada y salida del aceite y regularlas con la temperatura del agua de adicción a la CV.

En referencia a los outputs, estos corresponden a una única salida de la red, de tal forma que se crearon cuatro RNA´s para la predicción on-line de os componentes bioactivos (polifenoles totales, tocoferoles totales, carotenos y clorofilas) del AOVE que pueden variar en gran medida durante la clarificación. Adicionalmente se diseñaron 4 modelos más para la predicción de los parámetros reglados (acidez, peróxidos, K_{232}, K_{270}). La Tabla 2 muestra los niveles en los que variaron dichos parámetros a lo largo de todos los años del trabajo. Con la predicción on-line de estos parámetros se puede realizar una clasificación de los aceites producidos previa a su almacenamiento y conservación de los mismos con las características más homogéneas posibles.

Tabla 2. Rangos de los parámetros del AOVE obtenidos en el laboratorio con los métodos de referencia.

Parámetros	**Datos entrenamiento[1]**		**Datos Validación[2]**	
	Rango (min-max)	**SD**	**Rango(min-max)**	**SD**
Acidez (% of ácido oléico)	0.11-0.71	0.19	0.12-0.71	0.19
I. Peróxidos ($mEqO_2/kg$)	1.37-19.4	3.83	1.48-19.75	4.06
K_{232}	1.38-2.75	0.27	1.41-2.86	0.33
K_{270}	0.07-0.2	0.03	0.07-0.2	0.03
Polifenoles T. (mg/kg)	104-515	117	105-505	118.6
Tocoferoles T. (mg/kg)	257-418	34	264-398	31.1
Carotenos (mg/kg)	2.8-8.6	1.47	2.8-8.4	1.6
Clorofilas(mg/kg)	0.8-10.1	2.25	0.9-9.6	2.4

[1]n=70; [2]n=35

De la totalidad de datos (105), 70 datos correspondientes a la primera y tercera repetición de las muestras fueron utilizados en el entrenamiento. El resto (35) correspondiente a la segunda repetición fueron empleados en la validación de las redes.

3.2. *Modelos de RNA´s para el AOVE*

La topología óptima encontrada para cada red puede ser observada en la Tabla 3. Dentro de los parámetros regulados, las redes que predicen la acidez y los peróxidos encontraron en la composición 23/11/1 la combinación óptima de neuronas en las capas

ocultas, con las funciones de transferencia tangencial sigmoidal para cada capa, entrenando durante 50 iteraciones con la función 'trainrp'. Dichas redes obtuvieron altas correlaciones entre los datos reales y los estimados del orden de 0.99 y 0.94 respectivamente. Teniendo en cuenta que los rangos en los que ambos parámetros se han movido estaban dentro de la categoría virgen extra, los errores de predicción no fueron significativos y así lo indicó el t_e-Test realizado. La fiabilidad de las redes fue confirmada por los valores de RPD>3 y RER >10, superiores a los óptimos(Williams and Sobering, 1996, 1993).

Para los parámetros de absorción UV, las redes diseñadas coincidieron en número de neuronas por capa oculta 32 y22 y en el número de iteraciones realizadas (50). Aunque no utilizaron la misma combinación de funciones de transferencia de pesos entre los inputs y la primera capa oculta, logarítmica para K_{232} y tangencial para K_{270}. Se realizó una validación externa a la que se aplicó un t_e-Student al 95%, dando valores de t_{cal} 0.1,-0.24, -0.78 y 0.24 frente a t_{crit}=2.06 para la acidez, peróxidos, y absorción a 232 y 270nm respectivamente. Las probabilidades también fueron altas del orden de 0.92, 0.82, 0.44 y 0.81. Aunque para estos parámetros no se llegaron a encontrar diferencias significativas, la calidad de las predicciones de ambas redes no fue confirmada ya que los valores de RPD encontrados fueron muy inferiores a 3, obteniéndose el valor más alto de RER en 8.54. La Figura 3 muestra las correlaciones dadas por los diferentes modelos diseñados para estos componentes regulados.

Tabla 3. Óptimas topologías de RNA´s obtenidas para predecir el AVO a la salida de la CV y sus datos de validación

		RNA Entrenamiento				RNA Validación			
Parameters	**NT/NV[1]**	**Capas-Neurona**	**Transfer Layer F.**	**Train. F.**	**Iters.**	**r**	**RMSEP**	**RPD**	**RER**
Acidez (% of ácido oléico)	70/35	23/11/1	Tsg/Tsg/ Tsg	Trp	50	0.99	0.03	6.13	19.03
I. Peróxidos ($mEqO_2/kg$)	70/35	23/11/1	Tsg/Tsg/ Tsg	Trp	50	0.94	1.34	3.02	13.61
K232	70/35	32/22/1	Lsg/Tsg/ Tsg	Trp	50	0.86	0.17	1.94	8.54
K270	70/35	32/22/1	Tsg/Tsg/ Tsg	Trp	50	0.76	0.02	1.39	6.02
Polifenoles T. (mg/kg)	70/35	25/11/1	Tsg/Tsg/ Tsg	Trp	50	0.99	20	5.99	20.19
Tocoferoles T. (mg/kg)	70/35	35/22/1	Lsg/Tsg/ Tsg	Trp	50	0.91	14	2.19	9.45
Carotenos (mg/kg)	70/35	23/11/1	Tsg/Tsg/ Tsg	Trp	50	0.97	0.40	4.04	14.14
Clorofilas(mg/kg)	70/35	23/11/1	Tsg/Tsg/ Tsg	Trp	225	0.95	0.78	3.08	11.17

[1]NT: número de datos de entrenamiento NV: número de datos de validación; Tsg: función de transferencia tan-sigmoidal; PLn: función de transferencia linear; Lsg: función de transferencia log-sigmoidal; Trp: función de entrenamiento Resilient Backpropagation

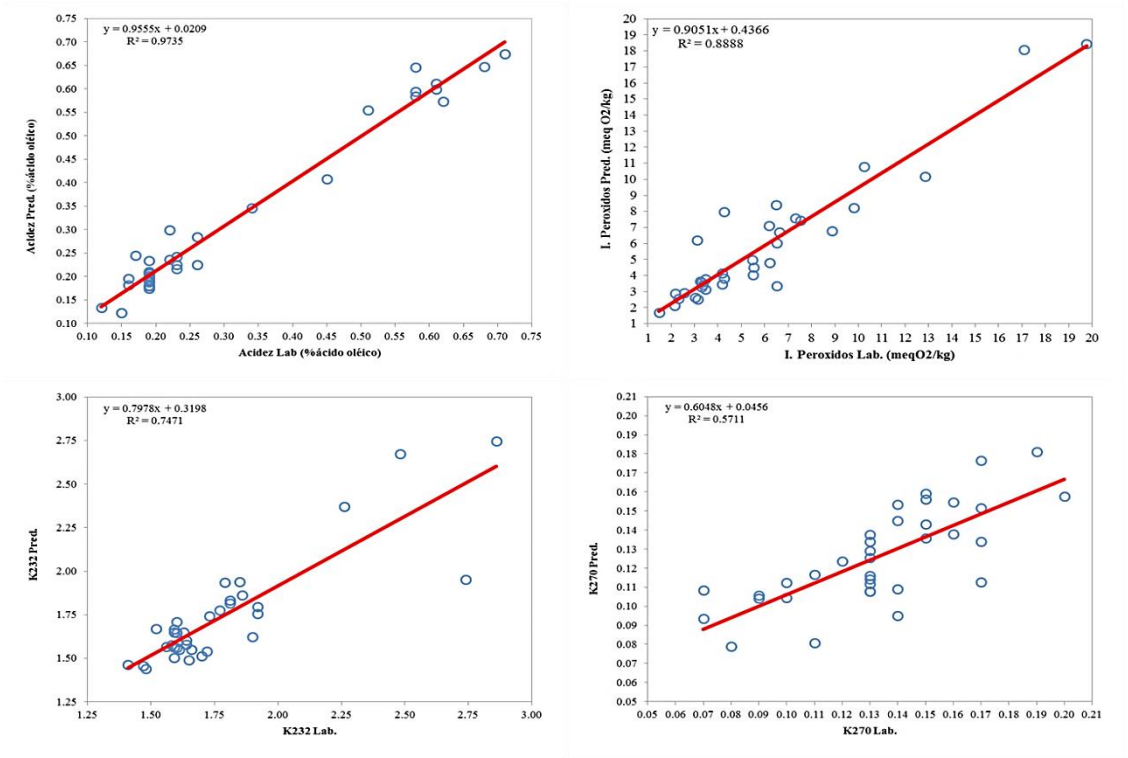


Figura 3. Correlación entre los datos reales y los predichos por las redes para los parámetros reglados

En relación con los componentes bioactivos del AOVE, todas las redes coincidieron en el número de neuronas entre capas ocultas (11) a excepción de los tocoferoles que obtuvo sus mejores resultados con el doble de neuronas(22), además de utilizar la función logarítmica para la transferencia de pesos entre la capa de entrada y la primera capa oculta. El resto de redes utilizaron la combinación ‘tansig’, ‘tansig’, ‘tansig’ par transferir la información entre capas. En referencia al número de iteraciones que realizaron, todas coincidieron en 50 con las redes de los parámetros reglados. Sólo la red diseñada para estimar los pigmentos clorofílicos necesitó 225 iteraciones. Las correlaciones obtenidas superaron el 0.90 entre los datos estimados y los reales. La Figura 4 muestra las correlaciones obtenidas por los diferentes modelos diseñados para estos componentes bioactivos. Los parámetros de calidad RPD y RER con valores muy superiores a los óptimos, a excepción del modelo neuronal predictivo para los tocoferoles que obtuvo RER= 9.45 muy próximo a 10.

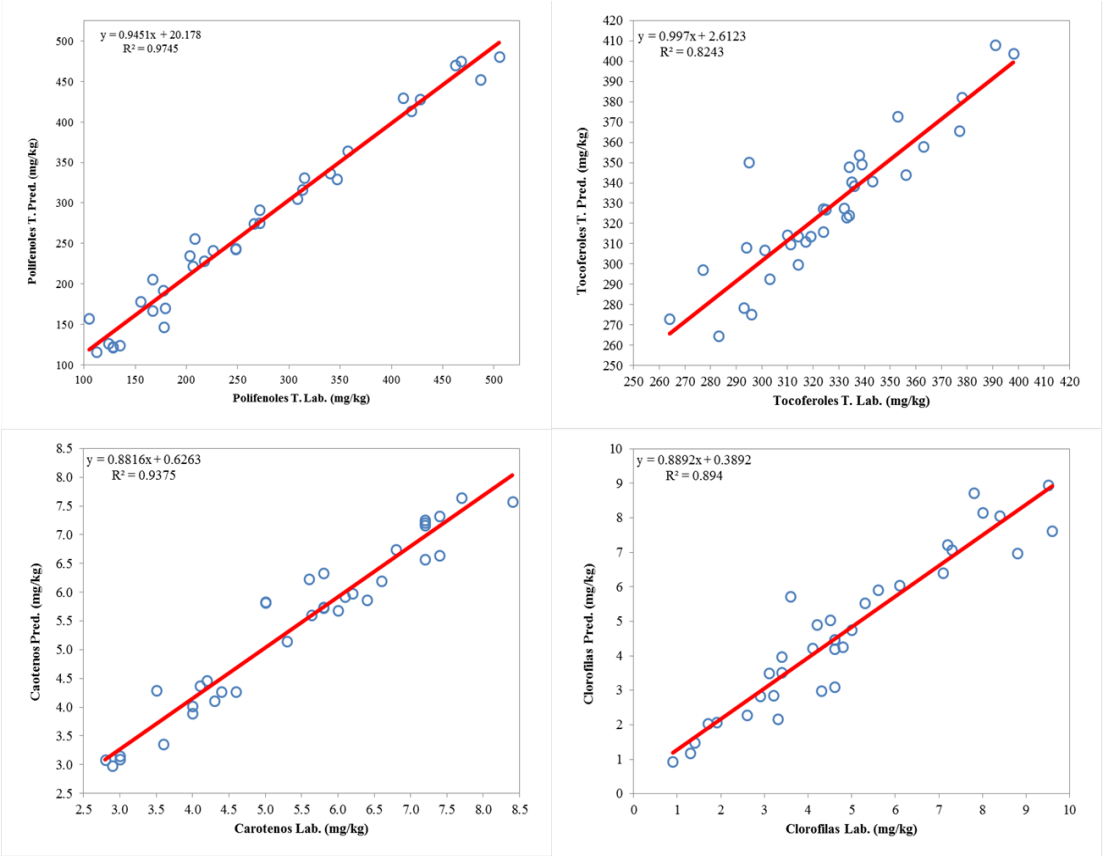


Figura 4. Correlación entre los datos reales y los predichos por las redes para los componentes bioactivos del AOVE.

En el t_e-Student de la validación externa los resultados fueron de t_{cal}=-0.09, 0.34, 0.12, -0.01, con valores de p=0.93, 0.73, 0.9, 0.99 para polifenoles, tocoferoles y pigmentos carotenos y clorofilas respectivamente. Ninguna diferencia significativa fue encontrada en dicha validación externa. Por todo ello, se puede decir que, todos los modelos predictivos predicen de manera fiable los parámetros para los cuales han sido diseñados.

No obstante, considerando la heterogeneidad que presentaron todos los parámetros, se escogieron algunos ejemplos de dicha variabilidad y el comportamiento de los modelos neuronales para cada parámetro que pueden observarse en la Tabla 4. El porcentaje de error entre los valores predichos y los valores reales aparecen en dicha tabla. Escasos han sido los trabajos con los que se pueda comparar este estudio. Diversos autores han estudiado de diferentes formas la rápida determinación de algunas de las características del AOVE aunque no podrían ser comparables al trabajar con aceituna intacta(Cayuela *et al.*, 2014; Furferi *et al.*, 2010, 2008, 2007; Salguero-Chaparro *et al.*, 2013; Salguero-Chaparro, L., 2014) en muchos casos. Otros modelos predictivos aceptables fueron

desarrollados mediante análisis PLS y un sistema NIR para medir on-line los niveles de los pigmentos contenidos en el aceite de oliva virgen extra a la salida de la CV(Jiménez Marquez, 2003). Considerando la diferencia en la metodología y la totalidad de muestras usadas en ambos casos, se obtuvieron valores de r ligeramente superiores a los de este estudio aunque los errores de predicción fueron prácticamente los mismos. En los estudios previos a este trabajo(Allouche *et al.*, 2015), se han desarrollado modelos predictivos a partir de RNA´s para estimar las principales características del aceite. Buenos resultados de predicción fueron encontrados, aunque no pueden ser comparados ya que los aceites caracterizados fueron obtenidos a escala de laboratorio y las redes no consideraron las mismas variables, ni datos espectrales.

Tabla 4. Ejemplos de la validación interna de las redes Neuronales Artificiales y sus porcentajes de error.

Parámetros		**Muestra**					
Entradas	A la entrada de la CV	Espectro AOTF-NIR	A	B	C	D	E
		Fwi (L/h)	86	511	635	301	238
		Foi (L/h)	173	165	80	144	146
		Twi (ºC)	14.5	14.1	13.6	33.3	12
		Toi (ºC)	21.3	22.3	20.5	24.4	16.7
	A la salida de CV	Foo (L/h)	155	167	120	185	156
		Too (ºC)	18.4	15	14	27.8	13
Salidas	Acidez (% of ácido oléico)	Real	0.22	0.17	0.17	0.22	0.23
		RNA	0.19	0.17	0.17	0.20	0.20
		%E	13.6	0.0	0.0	9.1	13.0
	I. Peróxidos ($mEqO_2/kg$)	Real	4	2.5	2.04	3.06	3.06
		RNA	4.35	2.45	2.19	3.39	3.55
		%E	8.7	2.0	7.4	10.8	16.0
	K_{232}	Real	1.59	1.65	1.5	1.53	1.5
		RNA	1.54	1.59	1.51	1.48	1.49
		%E	3.1	3.6	0.7	3.3	0.7
	K_{270}	Real	0.18	0.19	0.13	0.17	0.16
		RNA	0.15	0.16	0.15	0.14	0.14
		%E	16.7	15.8	15.4	17.6	12.5
	Polifenoles T. (mg/Kg)	Real	289	366	199	363	247
		RNA	323	378	165	365	221
		%E	11.8	3.3	17.1	0.6	10.5
	Tocoferoles T. (mg/Kg)	Real	382	406	353	420	399
		RNA	364	408	339	415	399
		%E	4.7	0.5	4.0	1.2	0.0
	Carotenos (mg/Kg)	Real	11.6	14.3	12.7	14	13.6
		RNA	10.2	13.6	12.7	12.9	13.4
		%E	12.1	4.9	0.0	7.9	1.5
	Clorofilas (mg/kg)	Real	15.4	19.3	19.5	17.3	16.4
		RNA	15.2	18.6	19.5	18.4	17.8
		%E	1.3	3.6	0.0	6.4	8.5

Se ha comprobado como las RNA´s son utilizadas en otros procesos industriales para la modelización de los mismos. Behroozi Khazaei *et. al*. (2013) presentaron un nuevo método para el modelado predictivo del proceso de secado de la uva. Con la ayuda de

una máquina de visión artificial se crearon RNA’s que utilizaron en la monitorización en línea y el control de este proceso.

4. Conclusiones

En base a los resultados obtenidos en este trabajo se puede concluir como los modelos obtenidos por la combinación de sistemas AOTF-NIR y RNA son aceptables y necesarios para predecir on-line los principales parámetros reglados, así como los componentes bioactivos del AOVE al final de la etapa de clarificación. El modelo predictivo de los polifenoles, tocoferoles y pigmentos de caroteno y clorofila proporciona una predicción ajustada de estos parámetros y ayuda a modular las características bioactivas y sensoriales del aceite de oliva virgen. De esta manera se podrá regular y modelar la centrifuga vertical para conseguir un AOVE de máxima calidad reglada y nutricional posible, mermando los consumos de agua y de energía. Además con la predicción on-line de la caracterización de los aceites, se podrá realizar una correcta clasificación previa a su almacenamiento en bodega.

Referencias

ABENOZA, M., RASO, J., ORIA, R., AND SÁNCHEZ-GIMENO, A.C., 2016. Debittering olive oil by liquid–liquid extraction: Kinetics and the effect on the quality of Arbequina olive oil. Eur. J. Lipid Sci. Technol. 118, 1243–1249

ALLOUCHE, Y., FUNES LÓPEZ, E., MAZA, G.B. and MÁRQUEZ, A.J. 2015. Near infrared spectroscopy and artificial neural network to characterise olive fruit and oil online for process optimisation. J. Near Infrared Spectrosc. *23*, 111–121. doi:10.1255/jnirs.1155

BEHROOZI KHAZAEI, N., TAVAKOLI, T., GHASSEMIAN, H., KHOSHTAGHAZA and M.H., BANAKAR, A. 2013. Applied machine vision and artificial neural network for modeling and controlling of the grape drying process. Comput. Electron. Agric. *98*, 205–213.

BELTRÁN, G., AGUILERA, M.P., FUNES, E. and JIMÉNEZ, A. 2012. Eliminación automática de las borras en depósitos de almacenamiento. Efecto sobre la calidad del aceite. Mercacei *72*, 191.

CASALE, M. and SIMONETTI, R., 2014. Review: Near infrared spectroscopy for analysing olive oils. J. Near Infrared Spectrosc. *22*, 59–80.

CAYUELA, J.A., YOUSFI, K., CARMEN MARTÍNEZ, M. and GARCÍA, J.M. 2014. Rapid Determination of Olive Oil Chlorophylls and Carotenoids by Using Visible Spectroscopy. J. Am. Oil Chem. Soc. *91*, 1677–1684.

CERT, A., ALBA, J., PÉREZ-CAMINO, M.C., RUÍZ-GÓMEZ, A. and HIDALGO, F. 1999. influencia de los sistemas de extracción sobre las características y los componenetes menores del aceite de oliva virgen extra. Olivae *79*, 41.

FARIA, S., RODRIGUES, C.A., NUNES, R. and DOS SANTOS, R.M. 2015. Evaluation of extra virgin olive oil stability by artificial neural network. Food Chem. *179*, 35–43.

FURFERI, R., CARFAGNI, M. and DAOU, M. 2008. Real-time estimation of peroxides and acidity level of extra-virgin olive oil: an integrated approach. Int. J. Math. Comput. Simul. 2.

FURFERI, R., CARFAGNI, M. and DAOU, M. 2007. Artificial neural network software for real-time estimation of olive oil qualitative parameters during continuous extraction. Comput. Electron. Agric. *55*, 115–131.

FURFERI, R., GOVERNI, L. and VOLPE, Y. 2010. ANN-based method for olive Ripening Index automatic prediction. J. Food Eng. *101*, 318–328.

JIMÉNEZ, A., BELTRÁN, G., AGUILERA, M.P. and UCEDA, M. 2008. A sensor-software based on artificial neural network for the optimization of olive oil elaboration process. Sensors Actuators, B Chem. *129*, 985–990.

JIMÉNEZ, A., GILA, A., BEJAOUI, M.A., AGUILERA, M.P., SÁNCHEZ, A. and BELTRÁN, G. 2014. La reducción de agua en la centrifugación vertical mejora la calidad del AOVE. Olimerca.

JIMÉNEZ A., HERMOSO, M., UCEDA, M., 1995. Elaboración del aceite de oliva virgen mediante sistema continuo en dos fases. Influencia de diferentes variables del proceso en algunos parámetros relacionados con la calidad del aceite. Grasas y Aceites *46*, 299–303.

JIMÉNEZ MARQUEZ, A., 2003. Monitoring carotenoid and chlorophyll pigments in virgin olive oil by visible-near infrared transmitance spectroscopy. On-line application. J. Near Infrared Spectrosc. *11*, 219–226.

JIMÉNEZ MARQUEZ, A., AGUILERA HERRERA, M.P., UCEDA OJEDA, M. and BELTRÁN MAZA, G. 2009. Neural network as tool for virgin olive oil elaboration process optimization. J. Food Eng. *95*, 135–141.

MASELLA, P., PARENTI, A., SPUGNOLI, P. and CALAMAI, L. 2010. Nitrogen stripping to remove disolved oxygen from extra virgin olive oil. Eur. J. Lipid Sci. Technol. *112*, 1389–1392.

MASELLA, P., PARENTI, A., SPUGNOLI, P. and CALAMAI, L., 2009. Influence of Vertical Centrifugation on Extra Virgin Olive Oil Quality. J. Am. Oil Chem. Soc. *86*, 1137–1140.

MÍNGUEZ-MOSQUERA, M.I., GANDUL-ROJAS, B., MONTAÑO-ASQUERINO, A. and GARRIDO-FERNÁNDEZ, J. 1991. Determination of chlorophylls and carotenoids by high-performance liquid chromatography during olive lactic fermentation. J. Chromatogr. *585*, 259–266.

OFFICIAL JOURNAL EUROPEAN UNION, 2014. Commission Implementing Regulation (EU) No. 1348/2013 amending Regulation (ECC) No 2568/91 on the characteristics of olive oil and olive-residue oil and on the relevant methods of analysis.

SALGUERO-CHAPARRO, L., BAETEN, V., FERNÁNDEZ-PIERNA, J.A., and PEÑA-RODRÍGUEZ, F. 2013. Near infrared spectroscopy (NIRS) for on-line determination of quality parameters in intact olives. Food Chem. *139*, 1121–6. doi:10.1016/j.foodchem.2013.01.002

SALGUERO-CHAPARRO, L. and PEÑA.-RODRIGUEZ, F., 2014. On-line versus off-line NIRS analysis of intact olives. LWT- Food Sci. Technol. *56*, 363–369.

VÁZQUEZ-RONCERO A., JANER DEL VALLE C. and JANER DEL VALLE M.L. 1973. Determinación de los polifenoles totales del aceite de oliva. Grasas y Aceites *24*, 350.

WILLIAMS, P.C. and SOBERING, D.C.1996. How do we do it: a brief summary of the methods we use in developing near infrared calibrations., in: Davies, A.M.C., Williams, P.C. (Eds.), Near Infrared Spectroscopy: The Future Waves. NIR Publications, Chichester, UK, pp. 185–188.

Capítulo 3.6. Resultados

Redes neuronales para la cuantificación en tiempo real en la almazara

Redes neuronales para la cuantificación en tiempo real en la almazara

Abstract

Modelos neuronales predictivos para cuantificar las características principales del orujo (contenido graso y de humedad), del mosto oleoso a su salida del decanter (humedad, impurezas y contenido en antioxidantes naturales) y del aceite de oliva virgen extra a su salida de la CV (compuestos regalados y nutricionales) fueron creados con la ayuda de la información espectral de cada componente (orujo, mosto oleoso y aceite) aportada por sensores ópticos AOTF-NIR y las diversas variables que intervienen en las fases de obtención del aceite de oliva virgen extra. Todas las redes aportaron buenos resultados predictivos superiores a 0.92 a excepción del contenido graso del orujo con un 0.86 y K_{270} con un 0.46 con bajos errores de predicción. La fiabilidad de las redes fue comprobada a través de los indicadores RPD y RER de la validación interna y a través de un test-t (95% de confianza) aplicado a una validación externa en la que no fueron encontradas diferencias significativas entre los datos reales y los estimados. Con los datos predichos por esto modelos neuronales se puede retroalimentar el sistema de control en planta, modelando así el proceso productivo del aceite de oliva en base a los criterios de extractabilidad y calidad que se establezcan.

Keywords: artificial neural network, olive oil, olive pomace, extraction process

Abbreviations: **AOTF-NIR,** Acousto-Optical Tunable Filters-Near Infrared; **AOVE,** Aceite de oliva virgen extra; **CV**, Centrifuga vertical; **DCH,** Decanter centrifugo horizontal; **F_p,** Caudal de alimentación al DCH; **F_{oi}**, Caudal del aceite a CV; **Fw,** Adición de agua de dilución de la masa; **Fwi**, Caudal del agua a CV; **L,** Punto de descarga de la masa en el DCH (mm); **MTN,** Micro talco natural; **R_1,** Posición punto de descarga del aceite del DCH (mm); **RER,** Rango de error relativo; **RMSEP,** Raíz del error medio cuadrático de la predicción; **RNA,** red neuronal artificial; **RPD,** Desviación residual predictiva; **Rv,** Revoluciones de molino; **Sd,** Grado de molienda;

T_m, Temperatura de la pasta; **t_m,** Tiempo de batido; **T_o,** Temperatura de la aceituna; **T_{oi},** Temperatura del aceite a CV; **T_{wi},** Temperatura del agua a CV.

1. Introducción

En los capítulos anteriores se han desarrollado modelos neuronales ya sea para aplicarse al proceso global de obtención de aceite de oliva virgen o por fases (acondicionamiento y extracción y clarificación). Sin embargo estas redes pertenecen a simples modelos predictivos de aceite de oliva virgen o de subproductos. Para poder instaurar estos modelos al proceso productivo para la optimización del proceso, es necesaria la cuantificación de las salidas de los modelos como son desde el orujo, el mosto oleoso hasta el aceite de oliva virgen. Estas cuantificaciones aportan en tiempo real los valores reales de dichas salidas, información imprescindible para realizar una comparación entre valores reales y valores predichos por los modelos desarrollados anteriormente, tal y como aparece en la Figura 1.

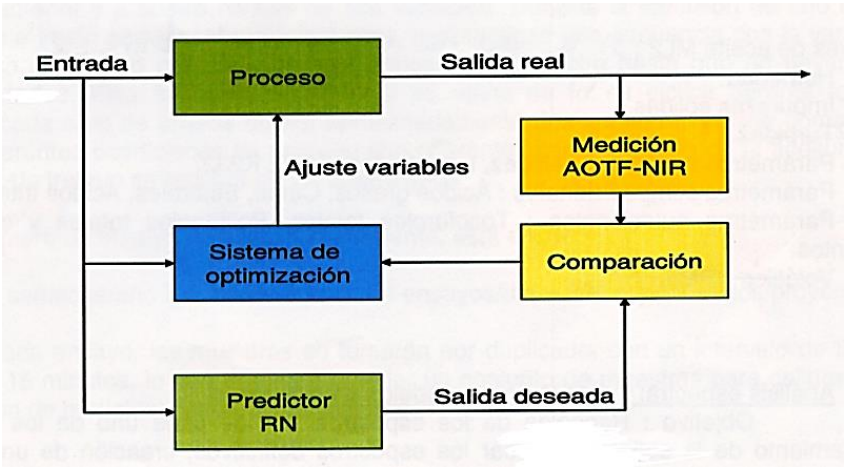


Figura 1. Sistema de optimización en planta real (Fuente. Memoria técnica del proyecto de modelado y optimización del proceso de elaboración de aceite de oliva virgen. Integración de sensores 'on-line' y técnicas de redes neuronales para la optimización del proceso. Proyecto de excelencia P10-AGR-6429).

Tras la comparación los modelos recogen la información y se retroalimentan modificando las variables mecánicas y tecnológicas que intervienen en el proceso, en función de las consignas iniciales interpuestas. De esta forma se cierra el ciclo de

optimización del proceso, que en función de que modelo se esté utilizando en ese momento, será global o por fases.

En base a esto, el objetivo de este apartado es el diseño de modelos neuronales de cuantificación del orujo, mosto oleoso, ambos a su salida del DCH y del aceite de oliva virgen a su salida de la CV, a partir de información on-line aportada por los sensores virtuales conectados al sistema AOTF-NIR, las variables influyentes en su obtención y los datos analíticos de cada parámetro. De esta forma se podrá obtener muchas ventajas, desde la modelización del proceso global de producción, modelización del proceso por etapas (extracción, clarificación) dando esta opción a las empresas que no tengan centrifugas verticales como sistemas de clarificación del aceite a modelar sólo hasta la fase de extracción. Aunque no sólo este tipo de fábricas podrían utilizar este sistema ya que, el hecho de utilizar la modelización y sistema de control por fases permite encontrar con facilidad algún problema que pueda surgir, así como podrá sufragar de modo correcto y sin mayor coste el cambio de maquinaria por problemas en la misma o por antigüedad. Además este sistema de modelización es capaz de extrapolarse a otras industrias.

2. Material y métodos

Tal y como se indicó anteriormente, este trabajo se llevó a cabo con aceituna de la variedad 'Picual' recogida mecánicamente y procesada en la almazara experimental del IFAPA Centro 'Venta del Llano' en Mengíbar (Jaén), en el sistema continuo de extracción de 45Tm/24h de capacidad instalado en la misma y descrito en otros trabajos(Allouche et al., 2015; Jiménez et al., 2008; Jiménez Marquez et al., 2009).

Durante los ensayos llevados a cabo durante varias campañas, en los modificando las variables del proceso en cada ensayo en base al estado de madurez de la aceituna y que fueron utilizados en los anteriores capítulos, se llevó a cabo la adquisición de los espectros a través de los sensores situados: a la salida del orujo del DCH, a la salida del mosto oleoso del DCH, antes del tamiz vibratorio y en el trasvase del primer tanque decantador de la CV al segundo. La recogida de espectros, la cual se hizo por triplicado, corresponde al mismo lote de aceituna seleccionado al pasar por las diferentes fases

Los sensores, conectados a un sistema Acousto-Optical Tunable Filters-Near (AOTF-NIR) Luminar 5030 (Brimrose Cor. USA) y controlados por ordenador, fueron situados en lugares estratégicos, optimizados en trabajos anteriores (Allouche et al., 2015; Jiménez et al., 2008; Jiménez Marquez et al., 2009) al igual que el conjunto de pre-tratamientos espectrales. Reducción de rango espectral de 1100 a 2150nm, PCA para la eliminar los espectros anómalos mediante Hotelling-T^2(realizados ambos en 'The Unscrambler 9.7'(Camo, Oslo)) y the 'Savitzky-Golay' first derivative (three smoothing points) en el programa de Matlab para disminuir los puntos espectrales 39 (Gorry, 1990). Los espectros recogidos del mosto oleoso en su gran mayoría fueron utilizados para el desarrollo de los modelos neuronales para la fase de clarificación.

Como en los anteriores casos de estudio que conforman esta memoria, durante cada ensayo, al final de la fase de extracción y en consonancia con el lote de aceituna seleccionado se recogieron tres muestras de orujo tras su correspondiente espectro. De igual forma, se hizo con el mosto oleoso a su salida del DCH, antes de pasar por el tamiz vibratorio. Tras esta recolección, el aceite pasó a ser clarificado y decantado previamente en los tanques anexos a la CV, donde en su trasvase y tras recoger el espectro, se tomo muestra del aceite de oliva (por triplicado).

Las muestras de orujo corresponden con las analizadas anteriormente en la modelización del proceso global y de las fases de acondicionamiento y extracción y por tanto, se les analizó el porcentaje de humedad (MP) y el contenido graso (FC) mediante el secado de las muestras en aire forzado de 105ºC(ISO 662:2016, 2016) y análisis en un equipo de resonancia magnética nuclear (RMN, Bruker, España) respectivamente. El contenido graso fue determinado sobre materia seca por (FDM) por

$$FDM(\%) = \left(\frac{FC}{100-MP}\right) * 100.$$

A si mismo, el mosto oleoso corresponde con las utilizadas en el desarrollo de los modelos neuronales para las fases de acondicionamiento y extracción, siendo analizados el contenido de humedad e impurezas de acuerdo a los métodos oficiales(ISO 662:2016, 2016; ISO 663:2007, 2007) y cuyos resultados se expresaron en wt %. Adicionalmente, el contenido en fenoles totales presentes en el aceite de oliva (mg/Kg de ácido caféico)

se determinó mediante extracción de éstos con metanol:agua a partir de una solución de aceite en hexano y su concentración fue determinada mediante colorimetría medida a 725nm usando Folin-Ciocalteau reagent de acuerdo con Vázquez Rocero et. al. (1973) (Vázquez-Roncero A. et al., 1973).

Las muestras de aceite, por su parte, se analizaron para la modelización del proceso global y sirvieron también para los modelos de la fase de clarificación, siendo las determinaciones realizadas las siguientes: acidez libre (% de ácido oleico), índice de peróxidos PV ($meqO_2/kg$) y los coeficientes K_{232}, K_{270} de absorción UV (Unión Europea 1348/2013(Official Journal European Union, 2014)), contenido de carotenos y clorofilas (mg/Kg) (Mínguez-Mosquera et al., 1991), El contenido en fenoles totales presentes en el aceite de oliva(Vázquez-Roncero A. et al., 1973) y el contenido total de tocoferoles, en mg/kg (ISO 9936:2016, 2016).

Siguiendo el modelo de esta memoria, las redes neuronales artificiales diseñadas en el programa Matlab software (Version 7.10.0.499, R2010a), fueron del tipo 'feed-fordward back-propagation' de aprendizaje supervisado basado en un algoritmo de gradientes descendientes. El óptimo diseño de las mismas fue encontrado de entre diversas topologías entre el número de neuronas por capa (1-90), las funciones de transferencia entre capa ('tansig', 'logsig', 'purelin'), los algoritmos de entrenamiento ('trainrp', 'trainlm') y el número de iteraciones (50-1000), tras la comprobación de la mejor correlación (r) entre los datos reales y los estimados con el mínimo error posible (RMSEP) en el mínimo tiempo posible. No obstante, se valoró la precisición y robustez de las redes diseñadas a través de los ratios de calidad RPD (Residual Predictive Deviation) y RER (Relative Error Range) y del t_e-Test de comparación de medias entre muestras pareadas (95% de confianza) de acuerdo con los anteriores modelos diseñados (Williams and Sobering, 1996, 1993).

3. Resultados y discusión

3.1. *Inputs y outputs*

El DCH constituye uno de los elementos esenciales dentro del proceso de extracción del AOV. En él tiene lugar la separación de las fases sólidas y líquidas. La

pasta de aceituna desde el punto de vista físico-químico es un sistema complicado, no obstante, la podemos considerar como una emulsión de aceite en agua con una gran concentración de sólidos en suspensión (25% de aceite, 45% de agua y 30% de sólidos, como valores medios). El hecho de obtener altos rendimientos viene influenciado por la existencia de pastas difíciles, que se extraen con suma dificultad y malos rendimientos, este hecho puede atribuirse en gran parte a las diferencias que los procesos químicos y enzimáticos originan en las fases sólidas de la misma, y por el funcionamiento del decanter que dependen de variables mecánicas y tecnológicas. Éstas variables junto con información espectral en tiempo real de las salidas tanto del orujo como del mosto oleoso servirán como inputs en el diseño de modelos neuronales de caracterización de los productos resultantes a través de la cuantificación de las mismas para poder regular el DCH a través de la retroalimentación de modelos neuronales simuladores del proceso, ya que el valor de las características de cada producto influye en el mismo, de forma que sus modificaciones se ajusten a la naturaleza del fruto que se procesa en cada momento, en base, a los objetivos de productividad y calidad marcados. Dichas variables, la temperatura de la pasta (Tm), la adición de agua (Fw), el flujo de pasta de alimentación al DCH (Fp) y su punto de alimentación (L) y el punto radial de salida del aceite del DCH (R_1), se encuentran en la Tab. 1 y son utilizadas para las redes del orujo y las mismas con la adición de temperatura del aceite de entrada ala CV (Toi) para las redes del mosto oleoso.

De igual forma se pretende caracterizar y cuantificar on-line el AOV a su salida de la centrifuga vertical. Gracias a los datos espectrales del AOV a su salida de la CV y las variables tecnológicas, mostradas en la Tabla 1, los ocho modelos neuronales a desarrollar retroalimentaran junto con la información que aporten los cinco anteriores el simulador de planta y ayudará a controlar el proceso.

Tabla 1. Variables mecánicas y tecnológicas del proceso.

Caracterización	**Parámetros**	**Abrevi.**	**Rango de valores**
Orujo[1]/ Mosto oleoso[2]	Temperatura de la pasta (°C)	Tm	16.6-36
Orujo[1]/ Mosto oleoso[2]	Adición de agua (L/h)	Fw	0-200
Orujo[1]/ Mosto oleoso[2]	Flujo de la pasta (Kg/h)	Fp	500-1300
Orujo[1]/ Mosto oleoso[2]	Punto de alimentación en el DCH (mm)	L	0-27.5
Orujo[1]/ Mosto oleoso[2]	Posición radial de la salida del aceite en el	R_1	98-100
Mosto oleoso[2]; AOVE [3]	Temperatura del aceite de entrada ala CV (°C)	Toi	18.6-34.7
AOVE [3]	Temperatura del agua de entrada a la CV (°C)	Twi	11-34
AOVE [3]	Caudal del aceite de entrada a la CV (L/h)	Foi	86-354
AOVE [3]	Caudal del agua de entrada a la CV (L/h)	Fwi	182-568
AOVE [3]	Temperatura de salida del aceite de la CV (°C)	Too	14-28
AOVE [3]	Caudal de salida del aceite de la CV (L/h)	Foo	49-390

[1] para un total de experimentos de n=279; para un total de experimentos de n=225; [3] para un total de experimentos de n=129.

En esta Tabla 1 se observan los variables utilizadas en cada caso, sí como el rango de valores que mostraron dichos parámetros durante todo el periodo y el número de experimentos o ensayos contemplados en el desarrollo de las redes, siendo 279 para el caso del orujo, 225 para el mosto oleoso y 129 para el AOV. Aunque durante los ensayos se realizaron por igual, la diferencia en número de los mismos se debe a la eliminación de los datos anómalos espectrales y analíticos.

Al mismo tiempo para educar a las redes neuronales creadas fue necesario los datos analíticos correspondientes en cada ensayo con los datos espectrales y los datos de las diferentes variables. En la Tabla 2, se muestran estos datos divididos de forma aleatoria, siendo 2/3 partes para entrenamiento y 1/3 para validación, así como sus rangos de trabajo y su desviación estándar (SD). Estos datos coinciden con los empleados en los anteriores capítulos formando cada uno de ellos parte de la caracterización de cada parámetro ya sea orujo, mosto oleoso o AOV. Además de esta tabla se puede deducir la gran variabilidad de datos con los que se trabaja aportando a las redes una gran experiencia, desde contenidos grasos de orujos de un 2% hasta casi

un 6%, con humedades de más de 20 puntos de diferencia entre el menor y mayor en los orujos; la cantidad de antioxidantes naturales en el mosto oleoso juegan dentro de un gran rango como lo indica una SD de 580.4; y dentro del aceite de oliva, los grados de acidez y el coeficiente de absorción UV K_{232} determinan calidades de extra y de virgen. Como se aprecian en los compuestos bioactivos, los frutos procesados fueron muy diferentes entre sí debido a diversos factores agroclimáticos junto con el procesado de los mismos.

Tabla 2. Datos analíticos de los productos resultados del proceso de AOVE.

Objetivos (Productos)	**Parámetros**	**Datos entrenamiento**		**Datos Validación**	
		Rango (min-	**SD**	**Rango(min-**	**SD**
Orujo	Contenido graso (%)	2.16-5.75	0.66	2.18-5.39	0.64
	Contenido en humedad (%)	51.57-72.78	3.36	56.98-71.67	3.29
Mosto	Contenido en humedad (%)	0.7-21.13	3.55	0.6-15.16	3.39
	Contenido en impurezas (%)	0.07-5.36	0.8	0.07-3.47	0.71
	Polifenoles totales (%)	289-3249	580.4	315-3110	567.6
AOVE	Acidez (% of ácido oléico)	0.11-1.17	0.19	0.12-1.17	0.19
	I. Peróxidos ($mEqO_2$/kg)	2.17-16.96	3.08	2.18-16.5	3.59
	K_{232}	1.45-2.7	0.26	1.45-2.63	0.22
	K_{270}	0.09-0.21	0.03	0.07-0.2	0.03
	Polifenoles T. (mg/kg)	108-515	101.5	118-505	105.6
	Tocoferoles T. (mg/kg)	258-418	30.6	269-411	31.4
	Carotenos (mg/kg)	2.9-8.6	1.27	3-8.4	1.27
	Clorofilas(mg/kg)	1-10.1	2.37	9.6-11.40	2.40

3.2. *Modelos neuronales*

Para caracterizar la extractabilidad del proceso y la calidad de los aceites obtenidos se crearon trece redes neuronales en base a las características del orujo (contenido graso y humedad), del mosto oleoso (contenido en humedad, impurezas y polifenoles) y del aceite de oliva a la salida de la CV (compuestos regulados y bioactivos). En su diseño participaron los inputs y outputs comentados anteriormente y se utilizó el mismo tipo de red neuronal backpropagation con aprendizaje

retroalimentado. Para todos los casos la función de entrenamiento usada fue ‘trainrp’, bajo diferentes combinaciones de neuronas y funciones de transferencia, llegando a obtener los mejores resultados al mismo número de iteraciones, 185.

Las topologías óptimas elegidas pueden observarse en la Tabla 3, para cada uno de los parámetros seleccionados de caracterización.

Tabla 3. Topologías óptimas de las RNA obtenidas para el orujo, mosto oleoso y características AOV.

		RNA Entrenamiento				RNA Validación			
Parámetros	**NT/ NV[1]**	**Capas-Neuronas**	**Transfer Layer F.**	**Train. F.**	**Iters.**	**r**	**RMSEP**	**RPD**	**RER**
Orujo									
Contenido graso (%)	186/93	29/14/1	Lsg/Tsg/Tsg	Trp	185	0.86	0.34	1.88	9.44
Contenido en humedad (%)	186/93	31/15/1	Tsg/Lsg/PLn	Trp	185	0.93	1.28	2.57	11.48
Mosto oleoso									
Contenido en humedad (%)	130/95	31/15/1	Tsg/ Tsg/ Tsg	Trp	185	0.97	0.82	4.11	17.67
Contenido en impurezas (%)	130/95	29/14/1	Tsg/ Tsg/ Tsg	Trp	185	0.96	0.20	3.55	17.00
Polifenoles totales(mg/g)	130/95	33/16/1	Tsg/ Tsg/ Tsg	Trp	185	0.97	141.7	4.01	19.72
AOVE									
Acidez (% of ácido oléico)	86/43	23/5/1	Tsg/ Tsg/ Tsg	Trp	185	0.99	0.03	6.79	37.50
I. Peróxidos ($mEqO_2/kg$)	86/43	29/5/1	Tsg/ Tsg/ Tsg	Trp	185	0.99	0.53	6.80	27.14
K_{232}	86/43	35/5/1	Tsg/ Tsg/ Tsg	Trp	185	0.92	0.10	2.21	11.86
K_{270}	86/43	35/15/1	Tsg/ Tsg/ Tsg	Trp	185	0.46	0.03	0.97	4.83
Polifenoles T. (mg/kg)	86/43	50/16/1	Tsg/ Tsg/ Tsg	Trp	185	0.99	17.61	6.00	21.98
Tocoferoles T. (mg/kg)	86/43	50/5/1	Tsg/ Tsg/ Tsg	Trp	185	0.97	7.51	4.18	18.91
Carotenos (mg/kg)	86/43	59/11/1	Tsg/ Tsg/ Tsg	Trp	185	0.98	0.29	4.46	18.95
Clorofilas(mg/kg)	86/43	26/10/1	Tsg/ Tsg/ Tsg	Trp	185	0.98	0.45	5.22	18.06

[1]NT: número de datos de entrenamiento NV: número de datos de validación; Tsg: función de transferencia tan-sigmoidal; PLn: función de transferencia linear; Lsg: función de transferencia log-sigmoidal; Trp: función de entrenamiento Resilient Backpropagation

3.2.1.*Orujo*

La combinación de neuronas 29/14/1 con las funciones de transferencia logarítmica-tangencial-tangencial fue la elegida para la red que caracteriza el contenido graso por su correlación (0.86) y error de predicción (0.34), aunque los parámetros de calidad RPD y RER fueron inferiores a los óptimos establecidos(P. Williams, 2008; Williams and Sobering, 1996). No obstante un valor de 9.44 en RER es muy próximo a 10 por lo que las estimaciones de la red pueden considerarse de calidad.

Para el contenido en humedad del orujo el número de neuronas elegido para las capas ocultas fueron 31 y 15 para la primera y segunda respectivamente. Aunque el número de neuronas fue muy similar a la red del contenido graso, las funciones de transferencia discreparon, siendo la función tangencial para la transferencia de información de input-oculta, logarítmica para la transferencia entre capas ocultas y finalmente con la lineal se transfirió la información desde la capa oculta hasta la salida. Con esta combinación de neuronas y funciones se obtuvo una correlación entre loa datos predichos y los reales de 0.93 dando un error RMSEP de 1.28 muy asumible. De hecho, aunque el valor RPD fue inferior a 3, sí superó el óptimo de calidad el parámetro RER con un 11.48(Williams and Cordeiro, 1985; Williams and Sobering, 1996, 1993).

En la Figura 2 se aprecia la correlación entre los datos reales y los predichos por la red siendo estos muy similares a los anteriores en ambos casos.

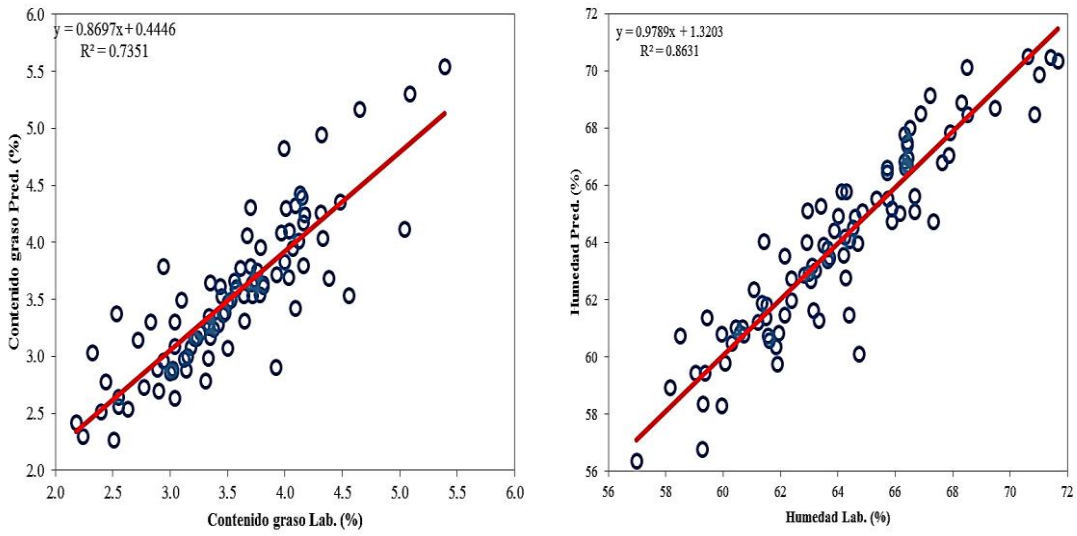


Figura 2. Gráficos de correlación de los valores preichos y reales del contenido de humedad en el orujo.

Correlaciones a la inversa fueron encontradas para el contenido graso y humedad en orujo de dos fases a través de sistemas NIR at-line, siendo estas de 0.97 y 0.88 con errores de 0.24% y 1.19% muy similares a los obtenidos en este estudio(García, J.A., Hermoso, M., Cáceres, 1996). Errores más altos del orden de 0.21% y 2.1% para contenido graso y de humedad en los orujos para el caso del NIR aunque con correlaciones superiores a este trabajo fueron obtenidas en la comparación de técnicas NIR y Raman (Muik et al., 2004). Sin embargo, en el estudio comparativo de distintas técnicas analíticas se consiguieron estimaciones con errores muy inferiores a los hallados anteriormente para el contenido graso (0.11%) y para el contenido en humedad de los orujos (0.60%) (García-Sánchez et al., 2005). En una comparativa con similar combinación de redes neuronales artificiales y sistemas NIR para predecir las características del orujo on-line, se observa como para el contenido graso y humedad se obtuvieron excelentes correlaciones del orden de 0.9804 y 0.9796 respectivamente, con errores del 0.20 y 0.55% (Jiménez et al., 2008) en relación con los resultados mostrados en este estudio. Este hecho viene derivado de la gran variabilidad de los datos empleados.

3.2.2.*Mosto oleoso*

Para la caracterización del mosto oleoso se crearon tres redes para cuantificar el contenido de humedad de impurezas y de polifenoles que ofrecía dicho producto. Para este diseño se utilizaron 130 datos para el entrenamiento y 95 para la validación interna, siendo las topologías óptimas muy similares entre sí con diferencias de 1 a 2 neuronas entre capas, ya sea primera o la segunda oculta, siendo 31/15/1 para el contenido de humedad, 29/14/1 para las impurezas y 33/16/1 para los polifenoles. Otra coincidencia fue encontrar la misma combinación de neuronas por capa para el contenido de humedad en el orujo y en el mosto oleoso, aunque con la discrepancia de la función de transferencia de la capa de entrada a la capa oculta que en el caso del orujo fue 'Logsig' y en este caso fue 'Tansig'. En el diseño de las tres redes coincidieron las funciones de transferencia las cuales fueron las tres iguales entre sí utilizando la función tangencial para transferir la información de cada capa como indica la Tab.3. Con estas topologías y después de 185 iteraciones se obtuvieron correlaciones muy altas (0.97 para la humedad y polifenoles y 0.96 para las impurezas) con errores de predicción de 0.82%, 0.20% y

141.7 mg/kg para la humedad, impurezas y polifenoles respectivamente. Estos resultados se pueden observar de forma gráfica en la Figura 3. Es claro destacar, que en el orujo la red de la humedad aportó errores superiores 1.28% frente a 0.82% aunque también la correlación fue inferior. En la validación interna empleada, los datos de referencia de calidad RPD fueron superiores al óptimo 3, de igual forma y en mayor grado que los referentes a RER, entre 7 y 9 puntos por encima del óptimo 10(Williams and Cordeiro, 1985; Williams and Sobering, 1996, 1993).

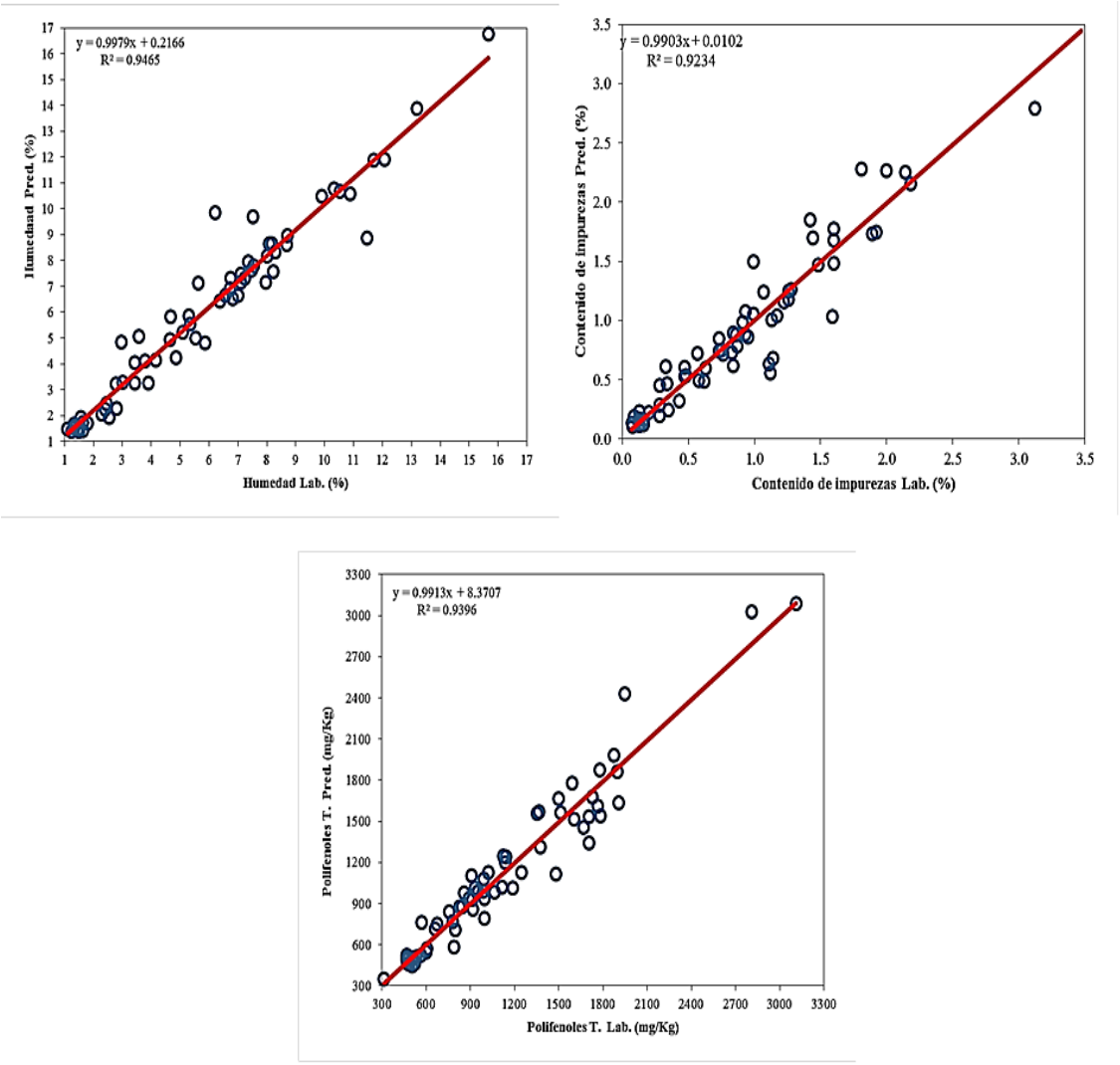


Figura. 3. Correlación lineal entre los valores reales y los predichos de los parámetros del mosto oleoso (humedad, impurezas y polifenoles).

En otros capítulos ya se comentó la falta de estudios a fecha de hoy con los que poder establecer comparaciones acertadas con el trabajo que se está exponiendo. Sólo Jiménez *et. al.* 2009 creó una red neuronal artificial para la estimación del contenido de humedad

en el mosto oleoso obteniendo buena correlación entre los datos reales y los estimados de r: 0.98 y un error de predicción mu inferior al conseguido en este estudio del orden de 0.04%(Jiménez Marquez et al., 2009). Este hecho puede deberse a la no utilización de sistemas NIR para el diseño de la red. En referencia al contenido en impurezas que posee el mosto oleoso no se hallaron trabajo previo que puedan servir de comparativa.

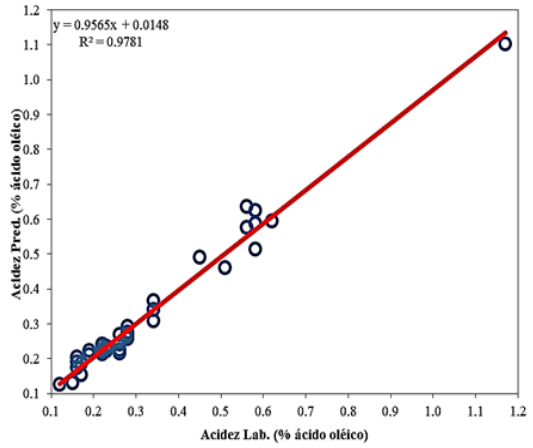
Para el caso de los polifenoles, es relativamente más frecuente encontrar estudios sobre el contenido de polifenoles en aceite de oliva que en mostos oleosos, aunque en diferentes estadios: embotellado con correlaciones de 0.74 y errores de 45.26mg/kg(Uncu and Ozen, 2015) o con el uso de diferentes tecnologías como la NIR arrojando resultados de R^2: 0.89 aunque con errores de predicción muy inferiores, RMSEP de 58.67mgkg^{-1} no siendo muy comparativos por el alto número de datos empleados en el caso estudio y la gran variabilidad existente entre ellos.

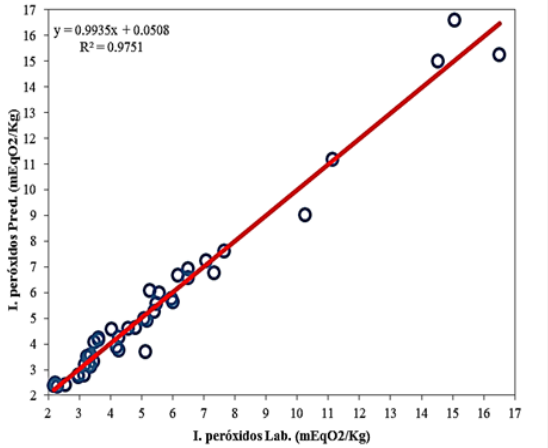
3.2.3.*AOVE*

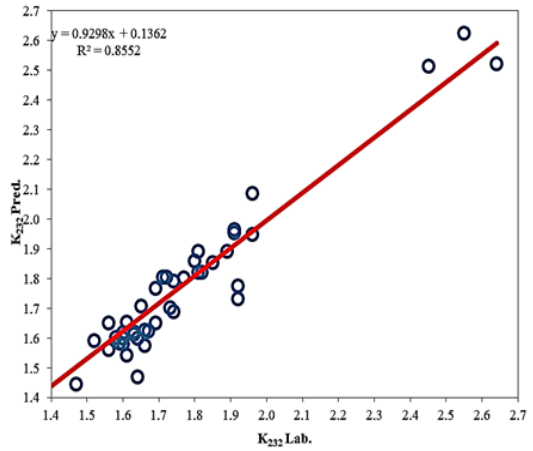
Para la cuantificación necesaria en la caracterización del AOVE se diseñaron ocho redes neuronales artificiales correspondientes, cuatro a compuestos reglados (acidez, peróxidos, K_{232} y K_{270}) y compuestos bioactivos (polifenoles, tocoferoles y pigmentos carotenos y clorofilas). Para la creación de dichas redes se utilizaron 129 datos de los cuales 86 se usaron para el entrenamiento y 43 para la validación de las redes. Todos los modelos neuronales se caracterizaron por emplear la misma combinación de funciones de transferencia entre sus capas: 'Tansig'-'Tansig'-'Tansig', así como la misma función de entrenamiento 'Trainrp' encontrando los mejores resultados a 185 iteraciones en todos los casos. El número de neuronas en la segunda capa oculta, en el caso de los compuestos reglados, salvo para K_{270}, fue igual, sin embargo el número de neuronas de la primera capa oculta varió entre ellas, salvo en las redes de absorción UV que fue 35. En cuanto a los resultados obtenidos, fueron las redes para cuantificar la acidez y los peróxidos, las que consiguieron correlaciones de r.0.99 como se observa en la Fig. 3, con errores insignificantes de 0.03% de ácido oléico y 0.53 mEqO_2/kg, respectivamente. Estas buenas predicciones son confirmadas por los valores RPD y RER muy superiores del orden de 6.80 y 37.5 respectivamente. Para los parámetros de absorción UV fue el K_{232} el cual consiguió correlaciones de 0.92 y errores de 0.10 frente a 0.46 y 0.03 que

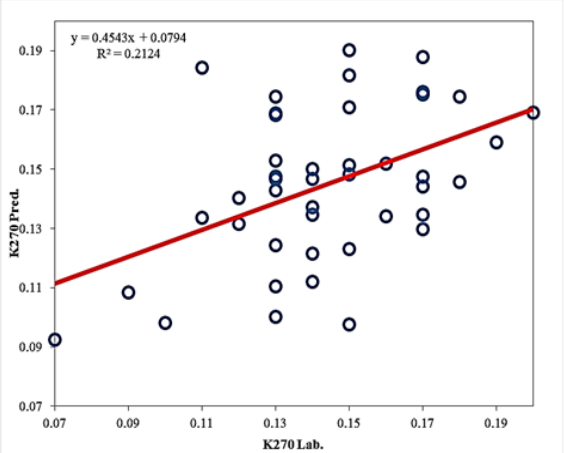
obtuvo K_{270}. Estas discrepancias en las cuantificaciones fueron mostradas en la Figura 3 y en los parámetros de calidad, ya que aunque, el parámetro K_{232} obtuvo un valor inferior al óptimo en el caso de RPD, si superó el valor de 10 para RER aportando la calidad y robustez en las predicciones. En este caso de parámetros regulados, el modelo diseñado para cuantificar el valor de K_{270} el único que no consiguió obtener predicciones fiables que sirvan para caracterizar el AOV a través de dicho parámetro.

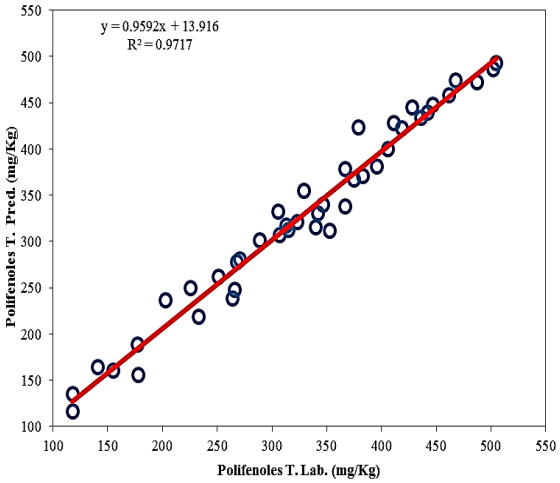
Para los compuestos bioactivos, los modelos diseñados coincidieron entre sí y con los compuestos reglados en relación con las funciones de transferencia, la función de entrenamiento y el número de iteraciones discrepando en el número de neuronas por capas, aunque por lo general fue alto para la primera capa oculta y bajo para la segunda. Independientemente de la combinación de neuronas que utilizara cada red, se obtuvieron altas correlaciones entre los datos predichos y los reales obtenidos en laboratorio, desde 0.97 a 0.99. Así mismo, los valores de RMSEP fueron muy bajos como se aprecia en la Tabla 3 y en la Figura 4. Por ejemplo, para los polifenoles, el error obtenido fue de 17.61mg/kg con una SD de 105.6, o los carotenos y clorofílicas de 0.29 y 0.45 mg/kg, con SD 1.27 y 2.40 respectivamente. Adicionalmente los valores de calidad de los parámetros RPD y RER se suman a la robustez de las predicciones y calidad de las mismas ofrecidas por los modelos diseñados siendo muy superiores a los óptimos establecidos(Williams and Cordeiro, 1985; Williams and Sobering, 1996, 1993).

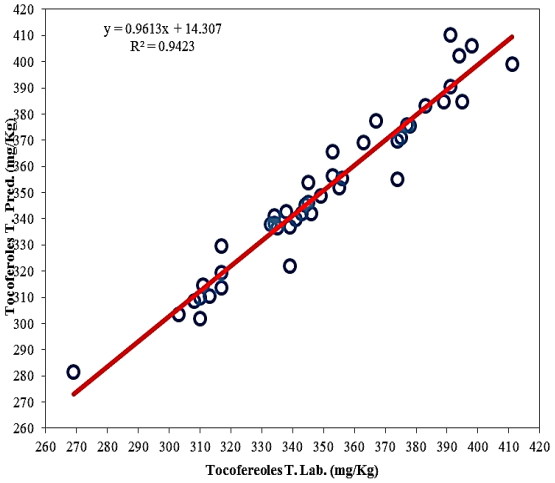

y = 0.9565x + 0.0148
R² = 0.9781
Acidez Pred.(% ácido oléico)
Acidez Lab. (% ácido oléico)


y = 0.9935x + 0.0508
R² = 0.9751
I. peróxidos Pred. (mEqO2/Kg)
I. peróxidos Lab. (mEqO2/Kg)


y = 0.9298x + 0.1362
R² = 0.8552
K232 Pred.
K232 Lab.


y = 0.4543x + 0.0794
R² = 0.2124
K270 Pred.
K270 Lab.


y = 0.9592x + 13.916
R² = 0.9717
Polifenoles T. Pred. (mg/Kg)
Polifenoles T. Lab. (mg/Kg)


y = 0.9613x + 14.307
R² = 0.9423
Tocoferoles T. Pred. (mg/Kg)
Tocofereoles T. Lab. (mg/Kg)

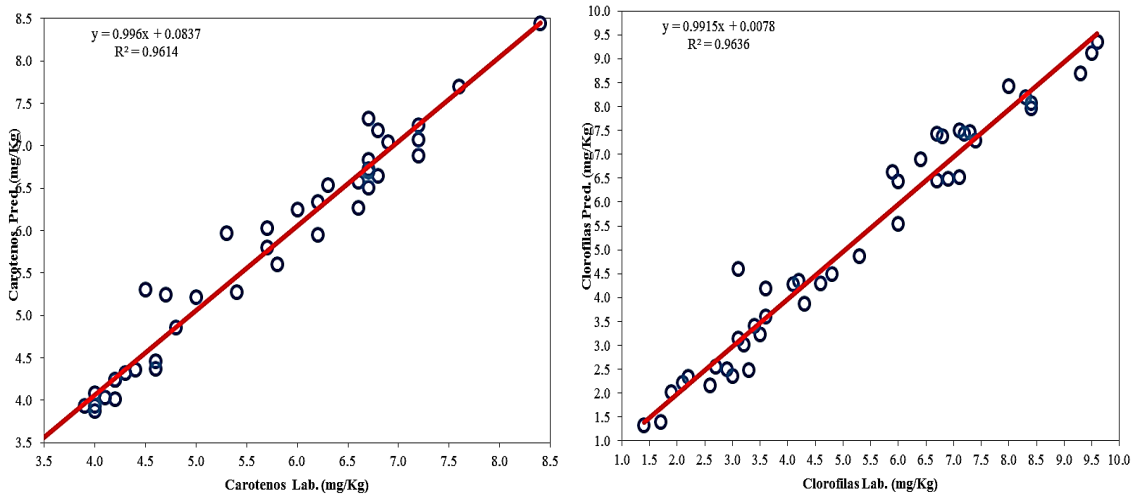
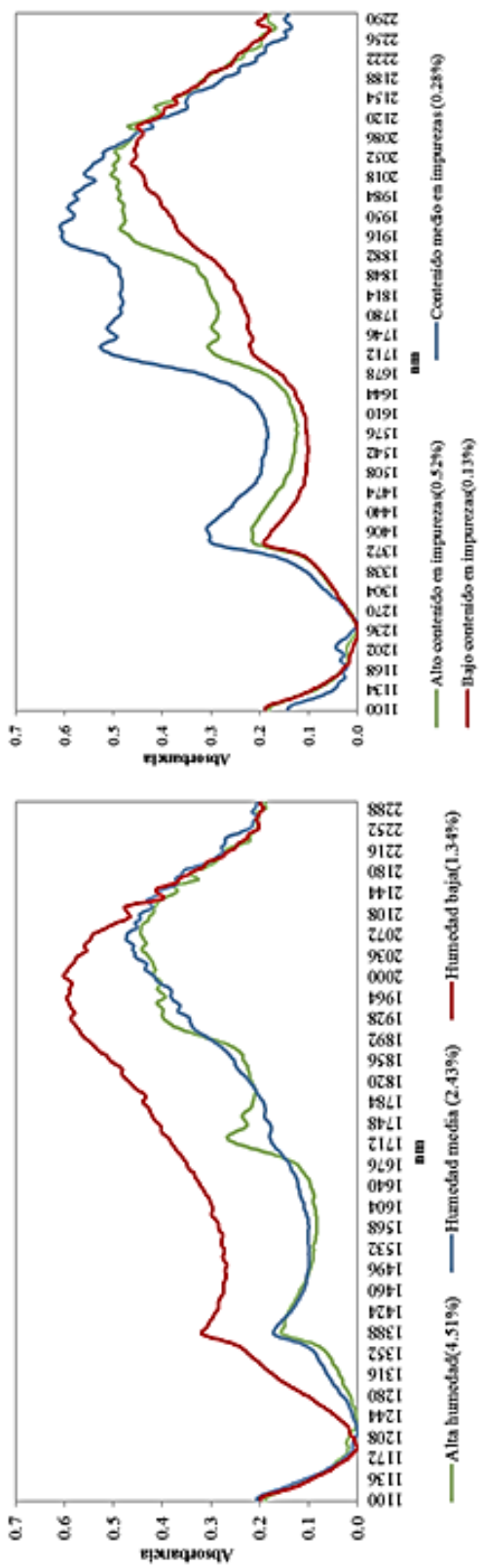


Figura 4. Correlación lineal entre los valores reales y los predichos de las características del AOVE (acidez, peróxidos, K_{232}, K_{270}, polifenoles totales, tocoferoles totales, carotenos y clorofilas).

Como ya se comentó anteriormente, sistemas NIR fueron utilizados en otros trabajos para análisis on-line del aceite de oliva dentro del diseño de modelos PLS para la determinación de la acidez(Bendini et al., 2007; Jiménez et al., 2005; Jiménez Marquez, 2003; Molto-Garcia et al., 2003) y otros parámetros como los pigmentos(Jiménez et al., 2005; Jiménez Marquez, 2003) aportando buenos resultados de validación con correlaciones superiores a R^2 a 0.89. De esta manera se aprovechó la versatilidad de dicha tecnología. Por otro lado, se desarrollaron trabajos para predecir on-line el contenido de acidez y peróxidos de AOVE a través de modelos neuronales, los cuales aportaron con altos errores de predicción del orden del 6% para la acidez y 5% para los peróxidos(Furferi et al., 2010, 2008, 2007). En estudios recientes y que conforman esta memoria se testó la calidad de las predicciones de las RNA`s de las características potenciales del AOVE, a partir de la información espectral de los frutos entrante en el proceso de extracción para lo cual, fue necesario extraer el aceite de dichos frutos en el sistema Abencor a escala de laboratorio(Allouche et al., 2015). En dicho estudio sólo para los parámetros de absorción UV, los modelos neuronales ofrecieron mayores correlaciones superando incluso los estándares de calidad representados por los valores RPD, el resto de los compuestos se comportaron de manera similar al del caso estudio. En referencia a los polifenoles Mailer, 2004 obtuvo a través de la tecnología NIR correlaciones inferiores (R^2: 0.89) con errores de predicción superiores (RMSEP: 58.67mgKg^{-1}) (Mailer, 2004) o valores de R^2 y RMSEP 0.74 y 45.26 mgkg^{-1} respectivamente para aceites embotellados(Uncu and Ozen, 2015).

3.3. *Validación externa de los modelos neuronales*

Adicionalmente, en la validación externa realizada a las trece redes neuronales con datos no usados en su diseño, se realizó un test t_e-Student, para analizar las varianzas de estos valores externos en busca de diferencias significativas entre los valores reales y predichos, no encontradas para ningún caso. Los valores de p en dicho test fueron superiores a 0.05. En la Tabla 4 se muestran los diez ensayos utilizados en esta validación, los cuales fueron recogidos al azar. Dentro de cada ensayo se encuentran las variables del proceso tecnológicas y mecánicas utilizadas en la validación de las redes divididas por compuestos a caracterizar, habiendo tres grupos orujo, mosto oleoso y AOVE. En dicha tabla se puede comprobar que las mismas condiciones del proceso del orujo sirvieron para el mosto oleoso con la adición de la temperatura a la entrada a la CV (Toi). Además de los datos del proceso, los espectros NIR ponen de manifiesto la variabilidad y semejanza existente entre ellos para cada compuesto en función del valor que éste tenga. Para visualizar esto, se adjuntan las Figuras 5, 6 y 7 correspondientes a los compuestos de caracterización del orujo, del mosto oleoso y del AOVE respectivamente. En las Tablas 5a,b se observan los resultados obtenidos en dicha validación para cada compuesto: a(contenido graso y humedad del orujo y contenido en humedad, impurezas y polifenoles para el mosto oleoso) y b (compuestos reglados y bioactivos del AOVE).



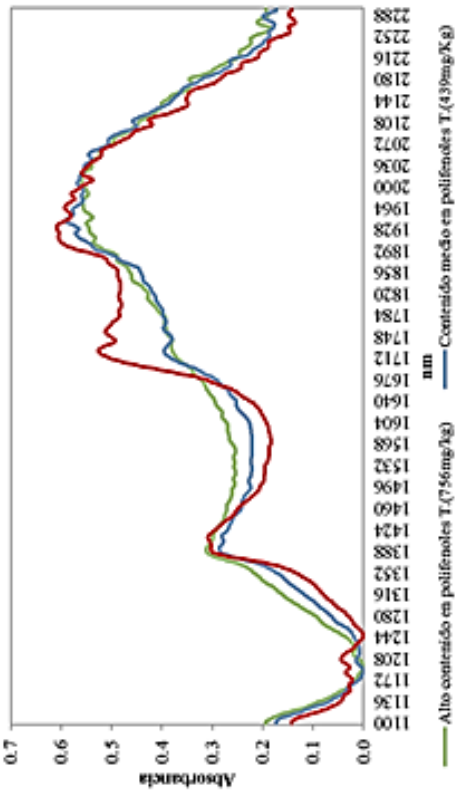


Figura 6. Espectros AOTF-NIR del mosto oleoso a su salida del DCH para diferentes contenidos de humedad, impurezas y polifenoles totales.

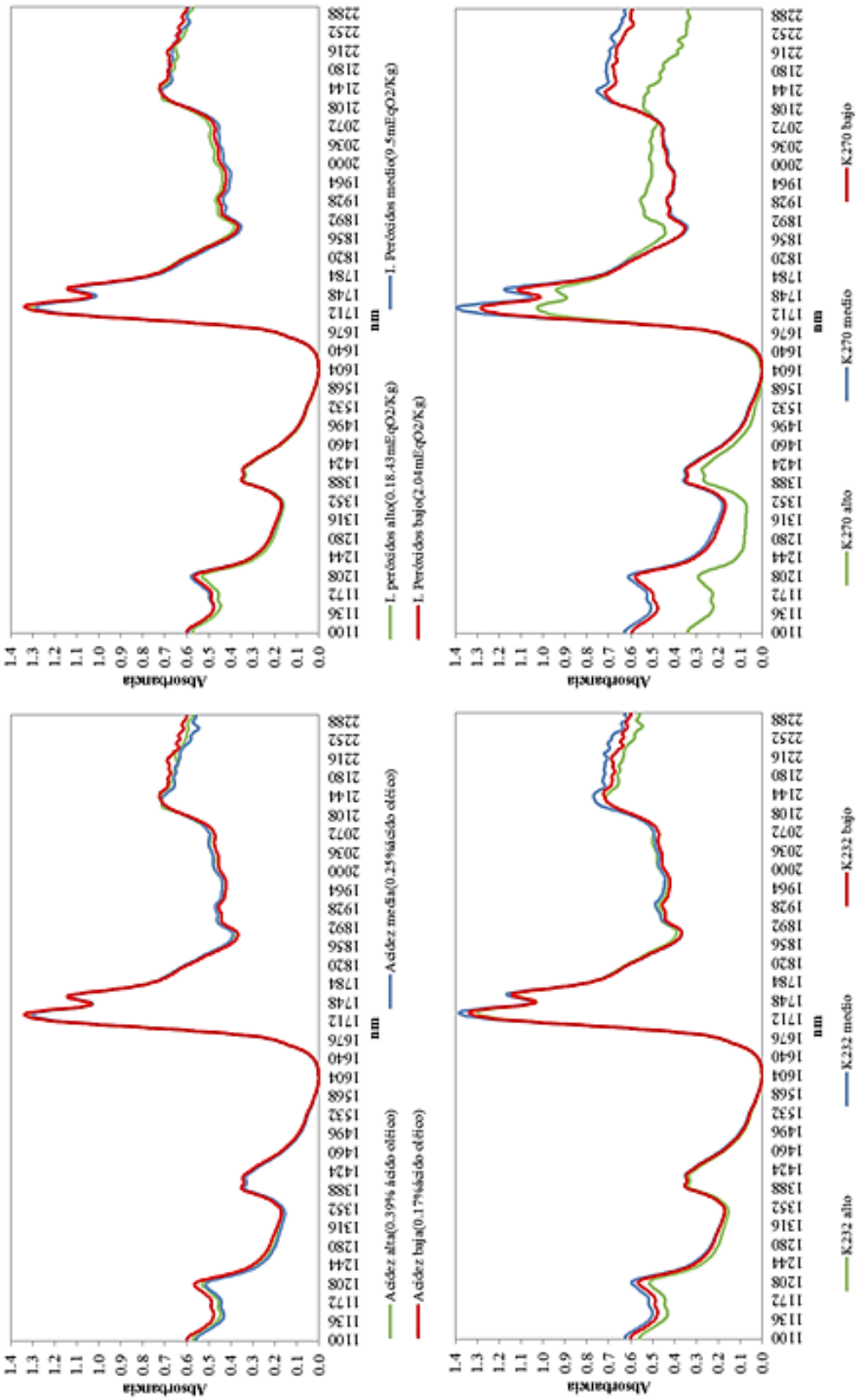


Figura 7. Espectros AOTF-NIR del AOVE a su salida de la CV para diferentes contenidos de sus características.

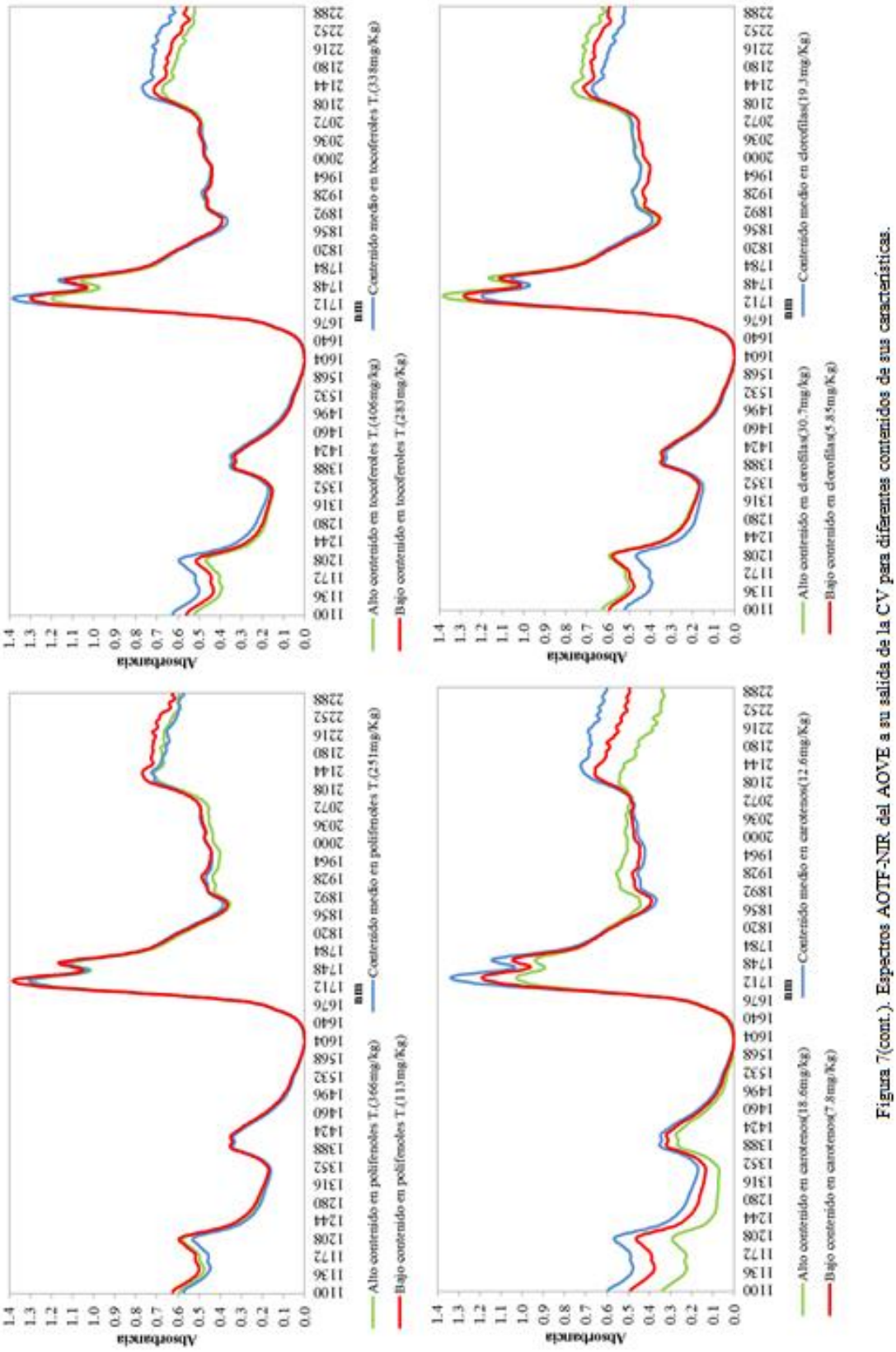


Figura 7(cont.). Espectros AOTF-NIR del AOVE a su salida de la CV para diferentes contenidos de sus características.

Tabla 4. Condiciones de proceso de varios ensayos dieron cuenta de validez externa de las ARNs.

Ensayo	Condiciones del proceso*											
	Tm*¯	Fw*¯	Fp*¯	R*¯	L*¯	Toi¯	Fwi*	Foi*	Foo*	Twi*	Toi*	Too*
1	18.8	42	900	98	0	21.3	86	172.8	155.2	14.5	21.3	18.4
2	21.3	157	950	98	0	24.3	510.6	165.3	167.1	14.1	22.3	15
3	16.7	99.5	960	98	0	16.7	635.3	79.8	119.9	13.6	20.5	14
4	23.1	4.6	960	98	0	24.8	237.6	146.1	155.9	12	16.7	13
5	30	167	1000	98	0	27.8	382.3	243.1	215.5	13.3	30	16.8
6	20.9	58	1180	98	0	22	411	166.4	138.5	13.2	23.1	14.8
7	19.1	137	1000	98	0	19.1	423.5	219.3	301.6	12.4	22	14.4
8	17.8	103	1000	98	0	21.2	239.2	195.7	181	13	19.1	13.3
9	19.1	85	1000	98	0	20.5	285	229	213	13.2	22.8	17.3
10	25.6	145	1000	98	0	26.5	289	207	205	13.6	23	16

*Condiciones del proceso para el orujo; ¯Condiciones del proceso para el mosto oleoso; *Condiciones del proceso para el AOV;

Tabla 5a . Varios ensayos dieron cuenta de la validez externa de las ARNs y el porcentaje de error.

Ensayo	Características del orujo						Características del mosto oleoso								
	Contenido graso (%)			Humedad (%)			Humedad (%)			Impurezas (%)			Polifenoles T. (mg/kg)		
	Real	RNA	%E	Real	RNA	%E	Real	RNA	%E	Real	RNA	%E	Real	RNA	%E
1	3.21	3.25	1.25	64.22	63.73	0.76	4.51	3.80	15.74	0.62	0.61	1.61	752	615	18.22
2	3.1	3.37	8.71	62.17	62.81	1.03	1.84	1.59	13.59	0.24	0.14	41.67	756	541	28.44
3	2.69	2.89	7.43	65.06	66.09	1.58	2.33	2.21	5.15	0.17	0.14	17.65	439	535	21.87
4	3.7	3.77	1.89	62.41	63.13	1.15	1.34	1.40	4.48	0.24	0.23	4.17	477	467	2.10
5	3.44	3.25	5.52	61.16	60.92	0.39	2.84	2.54	10.56	0.28	0.30	7.14	185	149	19.46
6	4.01	4.07	1.50	61.82	62.16	0.55	3.47	2.98	14.12	0.52	0.42	19.23	784	646	17.60
7	3.05	2.66	12.79	64.86	65.77	1.40	1.62	1.51	6.79	0.13	0.13	0.00	437	452	3.43
8	4.12	4.17	1.21	58.13	59.14	1.74	1.61	1.52	5.59	0.30	0.32	6.67	552	520	5.80
9	4.12	4.05	1.70	58.68	58.95	0.46	1.58	1.89	19.62	0.31	0.20	35.48	660	691	4.70
10	2.98	3.01	1.01	59.61	59.44	0.29	2.43	2.03	16.46	0.41	0.45	9.76	754	742	1.59

Tabla 5b . Varios ensayos mostraron validez externa de las ARN y el porcentaje de error.

Tabla 5b . Varios ensayos mostraron validez externa de las ARN y el porcentaje de error.

Parámetros regulados												
	Acidez			Peróxidos			K_{232}			K_{270}		
Ensayo	Real	RNA	%E	Real	RNA	%E	Real	RNA	%E	Real	RNA	%E
1	0.22	0.22	0.0	4.0	4.43	10.8	1.59	1.33	16.4	0.18	0.29	61.1
2	0.17	0.19	11.8	2.5	3.13	25.2	1.65	1.57	4.8	0.19	0.11	42.1
3	0.17	0.18	5.9	2.04	2.03	0.5	1.5	1.46	2.7	0.13	0.11	15.4
4	0.23	0.17	26.1	3.06	3.52	15.0	1.5	1.48	1.3	0.16	0.18	12.5
5	0.22	0.23	4.5	3.93	3.93	0.0	1.57	1.56	0.6	0.19	0.17	10.5
6	0.17	0.23	35.3	5.38	5.21	3.2	1.45	1.44	0.7	0.12	0.11	8.3
7	0.25	0.30	20.0	16.25	18.00	10.8	1.67	1.61	3.6	0.12	0.11	8.3
8	0.39	0.39	0.0	18.43	18.36	0.4	1.57	1.69	7.6	0.14	0.18	28.6
9	0.28	0.35	25.0	13.26	15.44	16.4	1.61	1.62	0.6	0.17	0.13	23.5
10	0.22	0.22	0.0	9.5	10.66	12.2	1.49	1.53	2.7	0.12	0.14	16.7
Parámetros nutricionales												
	Polifenoles T.			Tocoferoles T.			Carotenos			Clorofilas		
Ensayo	Real	RNA	%E	Real	RNA	%E	Real	RNA	%E	Real	RNA	%E
1	289	296	2.4	382	386	1.0	11.6	11.8	1.7	15.4	14.9	3.2
2	366	369	0.8	40	328	19.2	14.3	15.8	10.5	19.3	21.8	13.0
3	199	175	12.1	353	401	13.6	12.7	12.6	0.8	19.5	25.2	29.2
4	247	251	1.6	399	399	0.0	13.6	13.3	2.2	16.4	15.7	4.3
5	158	261	65.2	371	384	3.5	18.6	17.6	5.4	30.6	29.3	4.2
6	113	118	4.4	338	351	3.8	17.7	15.3	13.6	30.7	30.1	2.0
7	276	284	2.9	283	286	1.1	12.8	15.2	18.8	18.4	19.8	7.6
8	251	260	3.6	364	328	9.9	9.3	9.3	0.0	11.4	12.2	7.0
9	352	361	2.6	376	398	5.9	7.8	7.8	0.0	6.9	7.3	5.8
10	366	387	5.7	378	386	2.1	7.6	7.6	0.0	5.85	5.7	2.6

Observando la Tabla 4 mencionada se aprecia la variabilidad de las condiciones del proceso para todos los ensayos en todos los rangos altos, medios y bajos. En base a esto en la Tab. 5a se aprecian los porcentajes de error existentes para el contenido graso y de humedad en el orujo siendo un 12.79% el más alto coincidiendo con un elevado Fw,

seguido de un 8.71% para el contenido graso correspondiente a la red que obtuvo menor correlación para la caracterización del orujo. Por el contrario el porcentaje de error entre los datos reales y los predichos por la red del contenido de humedad fueron muy inferiores no superando el 2% correspondiendo a una adición de agua media-alta. En este caso no existe correlación entre el contenido de humedad del orujo y la adición de agua al DCH pues se observa como para niveles de adición de 149l/h, una cantidad muy elevada se obtiene errores del 0.29% y sin embargo, a niveles de adición inferiores del orden 4.6 se obtuvo 1.15% de error.

En cuanto a las características del mosto oleoso a pesar de las elevadas correlaciones obtenidas por las redes en los tres parámetros se obtuvieron porcentajes de errores muy dispares y variados. Para el contenido de humedad no se bajo de un 4.48% coincidiendo con la menor adición de agua al DCH y temperatura de la pasta media y se llegaron a errores de hasta 19.62% con adición de agua media y temperatura baja. En el caso de las impurezas hubo un caso a destacar en el que el error fue cero ya que la red predijo exactamente el valor de real de impurezas. Caso contrario fue en el ensayo nº 2 en el que se obtuvo un error del 41.67% aunque teniendo en cuenta que este error corresponde a 0.1% de impurezas de variación no se debe dar mayor importancia. Sin embargo, si cobra relevancia un error del 28.44% en el mismo ensayo nº2 para el caso de los polifenoles, pues la variación fue de 756 a 541. Estos 200mg/kg pueden ser cruciales en la clarificación del aceite cuando se añade agua, pues podría eliminar dichos compuestos al ser hidrosolubles. El hecho de que sea justo en el ensayo nº2, en el que se obtuvieron mayores porcentajes de error tanto en las características del orujo como del mosto oleoso da que pensar cualquier fallo en dicho ensayo derivado del proceso o del fruto.

Para los parámetros regulados del AOVE, es en K_{232} donde la red pronosticó de manera más exacta los resultados reales con menores márgenes de error. Aunque en la acidez y en los peróxidos, las correlaciones fueron muy elevadas, hay más variación en las predicciones siendo las más altas de 35.3 % y 25.2%, para la acidez y los peróxidos respectivamente. No cabe pensar que una red que no supera los índices de calidad de sus predicciones durante su diseño, trabajando con datos externos obtenga buenas

estimaciones. Este es el caso del parámetro K_{270} cuyos porcentajes de error no bajan del 8.3% llegando hasta el 61.1%.

En cuanto a los parámetros bioactivos o nutricionales salvo para casos aislados los polifenoles y los tocoferoles obtienen errores inferiores al 13%. Curiosamente es en el ensayo 5 cuando a mayor temperatura entra el aceite del DCH a la CV, se produce un mayor error de predicción del orden del 65%. En los tocoferoles coincidiendo con la acidez, peróxidos y K, así como las características del orujo y mosto oleoso obtuvo en el ensayo 2 su peor predicción.

Al igual ocurre con los pigmentos, siendo en el ensayo 7, con Fw medio y Foo alto cuando la red de los carotenos realiza su peor predicción. En el caso de las clorofilas fue en el ensayo 3 con Fw alto y Foo bajo cuando la red consigue un mayor error.

4. Conclusiones

En base a estos resultados se observa la alta capacidad predictiva de los modelos creados para todos parámetros del orujo, mosto oleoso y AOVE, así como la robustez y calidad de los datos predichos. Esto significa el gran valor que otorgan estas redes de cuantificación y caracterización dentro del modelo de control global de planta a la hora de retroalimentar el mismo de manera on-line y poder conseguir el modelado del proceso de obtención del AOVE en tiempo real de acuerdo con las premisas establecidas de antemano.

No obstante, se tiene que tener en cuenta que aunque la variabilidad de los datos ha sido muy grande, debido a las diversas combinaciones entre las variables intervinientes en el proceso y las características iniciales del fruto se debe seguir con el proceso de aprendizaje de los modelos neuronales, teniendo en cuenta los años agrícolas pasados y los venideros.

Referencias

Allouche, Y., Funes López, E., Maza, G.B., Márquez, A.J., 2015. Near infrared spectroscopy and artificial neural network to characterise olive fruit and oil online for process optimisation. *J. Near Infrared Spectrosc.* **23**, 111–121. doi:10.1255/jnirs.1155

Bendini, A., Cerretani, L., Di Virgilio, F., Belloni, P., Lercker, G., Toschi, T.G., 2007. In-process monitoring in industrial olive mill by means of FT-NIR. *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **109**, 498–504. doi:10.1002/ejlt.200700001

Furferi, R., Governi, L., Volpe, Y., 2010. ANN-based method for olive Ripening Index automatic prediction. *J. Food Eng.* **101**, 318–328.doi:10.1016/j.jfoodeng. 2010.07.016

Furferi, R., Carfagni, M., Daou, M., 2008. Real-time estimation of peroxides and acidity level of extra-virgin olive oil: an integrated approach. *Int. J. Math. Comput. Simul.* **2**.

Furferi, R., Carfagni, M., Daou, M., 2007. Artificial neural network software for real-time estimation of olive oil qualitative parameters during continuous extraction. *Comput. Electron. Agric.* **55**, 115–131. doi:10.1016/j.compag.2006.12.006

García, J.A., Hermoso, M., Cáceres, P., 1996. Determination of oil and moisture in two-phases olive pomace by using near-infrared spectroscopy. *Grasas y Aceites* **47**, 317–322.

García-Sánchez, A., Ramos Martos, N., Ballesteros, E., 2005. Estudio comparativo de distintas técnicas analíticas (espectroscopía de NIR y extracción mediante Soxhlet) para la determinación del contenido graso y de humedad en aceitunas y orujo de Jaén. *Grasas y Aceites* **56**, 220–227.

Gorry, P.A., 1990. General Least-Squares Smoothing and Differentiation by the. *Anal. Chim. Acta* **62**, 570–573.

ISO 662:2016, 2016. Animal and vegetable fats and oils. Determination of moisture and volatile matter content.

ISO 663:2007, 2007. Animal and vegetable fats and oils. Determination of insoluble impurities content.

ISO 9936:2016, 2016. Animal and vegetable fats and oils. Determination of tocopherols and tocotrienols contents by High-performance liquid chromatography.

Jiménez Marquez, A., Aguilera Herrera, M.P., Uceda Ojeda, M., Beltrán Maza, G., 2009. Neural network as tool for virgin olive oil elaboration process optimization. *J. Food Eng.* **95**, 135–141doi:10.1016/j.jfoodeng.2009.04.021

Jiménez, A., Beltrán, G., Aguilera, M.P., Uceda, M., 2008. A sensor-software based on artificial neural network for the optimization of olive oil elaboration process. *Sensors Actuators, B Chem.* **129**, 985–990. doi:10.1016/j.snb.2007.09.030

Jiménez, A., Molina, A., Pascual, M.I., 2005. Using optical NIR sensor for on-line virgin olive oils characterization. *Sensors Actuators, B Chem.* **107**, 64–68. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.snb.2004.11.103

Jiménez Marquez, A., 2003. Monitoring carotenoid and chlorophyll pigments in virgin olive oil by visible-near infrared transmitance spectroscopy. On-line application. *J. Near Infrared Spectrosc.* **11**, 219–226.

Mailer, R.J., 2004. Rapid evaluation of olive oil quality by NIR reflectance spectroscopy. *J. Am. Oil Chem. Soc.* **81**, 823–827. doi:http://dx.doi.org/10.1007/s11746-004-0986-4

Mínguez-Mosquera, M.I., Gandul-Rojas, B., Montaño-Asquerino, A. Garrido-Fernández, J., 1991. Determination of chlorophylls and carotenoids by high-performance liquid chromatography during olive lactic fermentation. *J. Chromatogr.* **585**, 259–266.

Molto-Garcia, E., Blasco-Piquer, M., Aparicio-López, R., 2003. Desarrollo de sensores para la evaluación de la calidad del aceite de oliva. *Agrícola vergel Frutic. Hortic. Floric.* **253**, 32.

Muik, B., Lendl, B., Molina-Díaz, A., Pérez-Villarejo, L., Ayora-Cañada, M.J., 2004. Determination of oil and water content in olive pomace using near infrared and Raman spectrometry. A comparative study. *Anal. Bioanal. Chem.* **379**, 35–41.

Official Journal European Union, 2014. Commission Implementing Regulation (EU) No. 1348/2013 amending Regulation (ECC) No 2568/91 on the characteristics of olive oil and olive-residue oil and on the relevant methods of analysis.

P. Williams, 2008. Near-Infrared Technology—Getting the Best Out of Light. a Short Course in the Practical Implementation of Near-Infrared Spectroscopy for the User, Edn. 5.3. ed. Nanaimo, Canada.

Uncu, O., Ozen, B., 2015. Prediction of various chemical parameters of olive oils with Fourier transform infrared spectroscopy. *LWT - Food Sci. Technol.* **63**, 978–984. doi:10.1016/j.lwt.2015.05.002

Vázquez-Roncero A., Janer del Valle C., Janer del Valle M.L., 1973. Determinación de los polifenoles totales del aceite de oliva. *Grasas y Aceites* **24**, 350.

Williams, P.C., Sobering, D.C., 1996. How do we do it: a brief summary of the methods we use in developing near infrared calibrations., in: Davies, A.M.C., Williams, P.C. (Eds.), Near Infrared Spectroscopy: The Future Waves. NIR Publications, Chichester, UK, pp. 185–188.

Williams, P.C., Sobering, D.C., 1993. Comparison of commercial Near-Infrared Transmittance and Reflectance instruments for analysis of whole grains and seeds. *J. Near Infrared Spectrosc.* **1**, 25–32.

Williams, P.C., Cordeiro, H.M., 1985. Effect of calibration practice on correction of errors induced in near-infrared protein testing of hard red spring wheat by growing location and season. *J. Agric. Sci.* **104**.

Capítulo 4. Conclusiones

A partir de los resultados obtenidos en esta memoria, se ha podido evidenciar que para un adecuado control y optimización del proceso de elaboración del aceite de oliva virgen, es preciso la intervención conjunta de técnicas avanzadas de análisis en línea y técnicas de control moderno capaces de trabajar en situaciones de **gran** incertidumbre.

La espectroscopía en el infrarojo cercano (NIR) se ha mostrado como una técnica fácilmente adaptable para la monitorización en tiempo real de los productos de entrada y salientes en cada etapa del proceso.

Por otra parte, el empleo de redes neuronales artificiales, como una ténica inteligente empleada en el control de procesos, ha resultado ser una herramienta adecuada para integrar toda la información (NIR y variables del proceso).

De los artículos publicados en eta memoria se ha observado, en general, como ambas técnicas pueden ayudar para un control más exahustivo del proceso, tanto a nivel de rendimiento industrial, como de las características del aceite elaborado, y de las cuales pueden extraer las siguientes conclusiones:

- El empleo de la tecnología NIR mediante equipos implantados en la línea de proceso, permite obtener, en tiempo real, información analítica precisa de las características de los diferentes productos: masa de aceituna, subproducto orujo y aceite.
- La combinación de la información de la espectroscopía NIR y las variables del proceso de elaboración que tienen un efecto en esta señal, pueden ser tratadas satisfactoriamente mediante el empleo de redes neuronales artificiales para la obtención de modelos predictivos de propiedades analíticas.
- El conocimiento de la masa de aceituna que se va a procesar es esencial para poder establecer ‘consignas objetivos’. Mediante NIR-ARN es posible conocer, con antelación, las características potenciales del aceite del fruto y su comportamietno extractivo, previendo las condiciones óptimas para su procesado.
- Las redes neuronales artificiales pueden emplearse para el modelado global o parcial del proceso de elaboración, creando modelos de planta virtuales en los

que los modelos neuronales construidos permiten predecir una propiedad a partir de la información espectral NIR y las correspondientes variables del proceso.

- El conjunto de todos los modelos construidos constituyen la base para el desarrollo de un sistema de optimización del proceso bajo un esquema de control retroalimentado, a partir de la comparación entre los valores reales medidos y los predichos mediante las RNA´s.
- Este sistema modelización ya sea global o por partes aporta la posibilidad de incorporarse a otras almazaras adaptándose a las variables, maquinaria y fruto a procesar.
- Este sistema de control por modelización proyecta la posibilidad de modelar los aceites tempranos en base a sus características nutricionales y regladas creando 'aceites a la carta' e ir adaptando dicho sistema a las variaciones establecidas en los objetivos.

La realización de esta Tesis Doctoral ofrece, pues, una visión general para la modernización del sector del aceite de oliva aportando innovación al proceso de extracción que puede quedar reflajado en una mejora de la calidad de los aceites, sin olvidar la productividad del proceso y la consecuente optimización de costes y energía, postulándose como herramienta útil para el técnico de almazara en su labor de control y optimización del proceso.

Los estudios llevados a cabo durante esta tesis ofrecen nuevas líneas futuras de trabajo, entre ellos:

- La implementación de los modelos neuronales desarrollados en un software que se adapte a los actuales instalados en fábrica de forma rápida, precisa y de fácil manejo.
- Diseño de nuevas estrategias de modelado basadas en el control y optimización mediante 'neurocontroladores inversos'.
- 'Soft computing', aplicación conjunta de diversas técnicas de control inteligente en la optimización del proceso.

Anexos:

Contribuciones a revistas internacionales y a congresos

Journal of Sensor Technology, 2015, 5, 28-43
Published Online March 2015 in SciRes. http://www.scirp.org/journal/jst
http://dx.doi.org/10.4236/jst.2015.51004

Scientific Research Publishing

A Review: Artificial Neural Networks as Tool for Control Food Industry Process

Estrella Funes, Yosra Allouche, Gabriel Beltrán, Antonio Jiménez

IFAPA Venta del Llano (Andalusia Regional Government), Jaén, Spain
Email: estrellab.funes@juntadeandalucia.es

Received 9 February 2015; accepted 25 February 2015; published 28 February 2015

Copyright © 2015 by authors and Scientific Research Publishing Inc.
This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).
http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/
Open Access

Abstract

In the last year, interest in using Artificial Neural networks as a modeling tool in food technology is increasing because they have found extensive utilization in solving many complex real world problems. Due to this and as previous step at development of some project, this paper intends to introduce the reader inside neural networks: general characteristics of the ANN, their architectures, their rules of learning, types of networks and ANN's create process. Also this paper presents a comprehensive review of food industrial applications of artificial neural networks in the last year. ANN industrial applications are grouped and tabulated by their main functions and what they actually performed on the referenced papers with except the applications in the olive oil industry that are described with special emphasis.

Keywords

Artificial Neural Networks, Olive Oils, Sensor On-Line, Process Control

1. Introduction

In the last decades important researches in the area of artificial intelligence were developed. One of the main objectives of the science is the implementation of new technologies with capacities approaching the human being, and even better. Artificial intelligence is a powerful accomplishment in various fields, since it can supplement the human being in various activities, both easy to perform, how complex and even impossible to make as it is carrying out an activity without interruption for long periods of time and where knowledge is required.

In the search on the nature of intelligent mechanisms to try to develop machines that perform complex tasks, it is important to observe certain characteristics of human brain that can be considered crucial to the development of artificial neural networks (ANN).

Artificial neural networks are control systems necessary to solve problems in which the analytical methods

How to cite this paper: Funes, E., Allouche, Y., Beltrán, G. and Jiménez, A. (2015) A Review: Artificial Neural Networks as Tool for Control Food Industry Process. *Journal of Sensor Technology*, 5, 28-43. http://dx.doi.org/10.4236/jst.2015.51004

are difficult to apply and their results have to be in a specific interval, e.g., in real time. The main objective of ANN is the development of mathematical algorithms that will enable ANNs to learn by mimicking information processing and knowledge acquisition in the human brain. ANN models contain layers of simple computing nodes that operate as nonlinear summing devices. These nodes are richly interconnected by weighted connection lines, and the weights are adjusted when data are presented to the network during a "training" process. Successful training can result in artificial neural networks that perform tasks such as predicting an output value, classifying an object, approximating a function, recognizing a pattern in multifactorial data, and completing a known pattern [1] [2].

The objective of this paper is to provide a preliminary understanding of ANNs and answer why and when these computational tools are needed, how they are used and their possible applications inside food industry and giving as example the field of the olive grove and olive oil industry. A field of olive oil which is undergoing a constant technological evolution.

2. Similarities between Biological Neural Networks (BNN) and Artificial Neural Networks (ANN)

2.1. Biological Neuron

The human nervous system consists of billions of neurons of various types and lengths relevant to their location in the body. Every neuron shares many characteristics with other cells of the human body but it has particular and special properties to receive process and transmit an electric signal through all the interconnections of the brain communication system [3]. Some neurons are connected with receivers or effectors and others are connected to transmit and process information. The area of connection is called a synapse and binds the axon of a neuron with dendrites of the adjacent as shown in Figure 1.

The information is transmitted from one neuron to another. This information is transmitted in the form of impulses through the dendrites. Impulses tend to excite the cell. When the excitation accumulated exceeds a threshold value, the neurons send a signal through the axon to other neurons. The majority of the ANN models present the basic operation of the neuron [4].

2.2. Artificial Neuron

Artificial neurons are models that attempt to simulate the behavior of biological neurons. Each neuron is represented by processing unit that forms a part of one greater entity: the neural network. In general, each neuron sends its output to others by its axon and the axon takes information through potential differences or waves of power, which depends on the potential of the neuron. The input signals are produced by its synapse, adding all excitatory influences [ANN simulates it by positive weights and inhibit by negative weights]. If positive

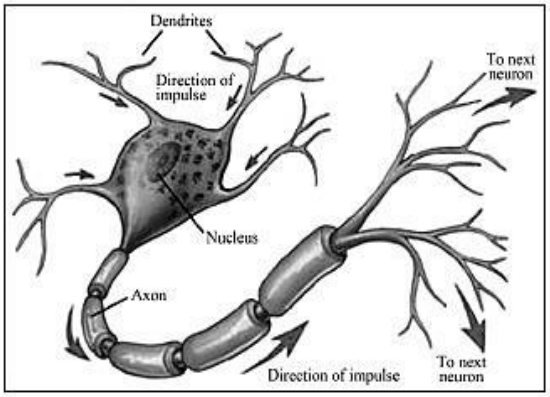


Figure 1. Structure ofa biological neuron. To can compare the performance of artificial neural it must know the structure of a biological neuron [4].

excitatory influences dominate, the neuron gives a positive signal and sends this message to other neurons by its output synapse. According to Figure 2, this unit of process (artificial neuron) consists of a series of entries Xi (x_1, x_2,...x_n), which are equivalent to the dendrites where they receive information in the form of stimulation. The weights that exist in the synapses Wi are equivalent in biological neuron to transmit mechanisms. The union of these values (Xi and Wi) equals the inhibitory and excitatory chemical signals that occur in the synapses and to induce neuron to change their behavior. These values are the gateway of the network weighting function that converts these values in potential.

This potential is equivalent to the total number of signals that arrive on a neuron in the biological neuron by their dendrites. The weighting function is a weighted sum of the inputs and the synaptic weights. The output of weighting function comes from the activation function that transforms this value into another form that the outputs neurons can work. The output network is evaluated in the activation function that gives rise to this neuron signal output to another neighbor. The activation function will be given by the potential of resulting that can be of different ways (Table 1). In summary, the artificial neuron behaves as a biological neuron but in a very simplified way [3].

3. ANN: Models, Characteristics, Architecture, Learning

3.1. Models of Artificial Neural Networks

In the Table 2 it can find the principal and known models of artificial neural networks.

3.2. Characteristics of an Artificial Neural Network

Artificial neural networks have a large number of features similar to the brain due to its constitution and its foundations, as it can be to learn from the experience [4]. The artificial neural networks are increasingly used in new technologies in various areas, and present a lot of advantages such as:

- Adaptive learning capacity consists on learning how to perform some tasks by training with illustrative examples. Neural networks are dynamic adaptive systems, due to their process units. The neurons can adjust themselves and change depending on the new conditions that appear. In fact, a neural network can generate its own weight distribution by means of learning and even after this continue learning. When designing a neural network must be given the appropriate structure for its learning and training with pattern. It is necessary to develop a good algorithm of learning that provides the network the ability to discriminate, by training with patterns.

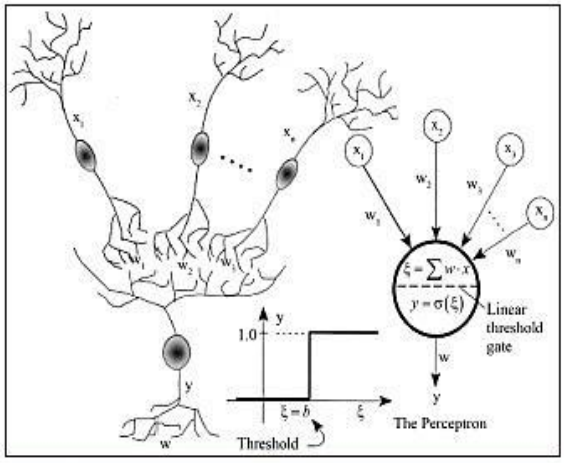
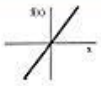
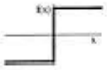
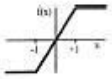
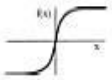
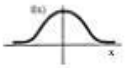
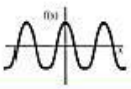


Figure 2. Similarity among a biological neuron and an artificial neuron. In this figure it can observe the difference and similarly between both neuron [4].

Table 1. Roles of activation of an artificial neural network. These roles are necessary can activate an ANN. According the use of which network the role will be different [4].

Name	Formula	Range	Graphical
Identity	$y = x$	$[-\infty, +\infty]$	
Unit step	$y = sign(x)$ $y = H(x)$	$\{-1, +1\}$ $\{0, +1\}$	
Piecewise linear	$y = \begin{cases} -1, \text{si } x < -1 \\ x, \text{ si } +1 \leq x \leq -1 \\ +1, \text{si } x > +1 \end{cases}$	$[-1, +1]$	
Sigmoid	$y = 1/(1+e\hat{}(-x))$ $y = tgh(x)$	$[0, +1]$ $[-1, +1]$	
Gaussian	$y = Ae^{-Bx^2}$	$[0, +1]$	
Sinusoidal	$y = A\sin(\omega x + \varphi)$	$[-1, +1]$	

- Self-organization. The neural networks employ their ability to adaptive learning for to autoorganize the information they receive during learning and/or the operation. In this way, neural networks are able to give an answer to a new situation, solve problems in which the input information is not very clear or incomplete.
- Tolerance to failures. Neural networks tolerate failures with respect to the data that extract or abstract the essential features of the learned entries, so they can properly process incomplete or distorted data. Furthermore, networks can continue their function (with some degradation) although destroyed part of the network. This is because the neural networks have their information distributed in the connections between neurons. These connections will have their values according to received stimuli, and an output pattern that represents the information stored that will generate.
- Operation in real time. Neural computations can be performed in parallel. Most of the networks can operate in a real-time environment, the need for change in weights connections or training is minimal.
- Easy insertion into existing technology. A network can be rapidly trained, tested, verified and transferred to a hardware implementation [5].

3.3. Architecture of a Neural Network

The artificial neuron is an element of simple processing that produces a single output from an inputs vector. When talk about architecture of an ANN, must be taken into account:

- Number of level or layers: the distribution of neurons in the neural network is done forming levels or layers of a determined number of nodes each one. There are input, output and hidden layers.
- Connection patterns depending on the links between the elements of the different layers. The ANN can be classified as totally connected when all the outputs from a level get to all and each one of the nodes in the following level. In this case, there will be more connections than nodes. When some links in the network are lost, the network is partially connected.

Table 2. Summarize the well-known neural networks models (own elaboration).

Name	Applications	Commentaries	Limitations	Year	Creators
Perceptron (P)	Recognition of characters printed	The oldest network	You may not recognize complex characters	1958	Rosemblatt
Adaline/Madaline	Filtering of signals. Equalizer Adaptive	Quick, easy implement with analog circuits	It is only possible classifying spaces linearly separated	1960	Widrow
Avalanche	Recognition of talks continued. Robot control	No network easy done these tasks	It is not easy to alter the speed or interpolate the movement	1967	Grossberg
Cerebellation	Control of the movement of arms of a robot	Similar to Avalanche	It requires complicated control inputs	1969	Marr, Albus,
Brain-State-Box	Extraction of knowledge database	Possibly best realization that SAS Hopfield networks	Potential realization applications not completely studied	1977	Anderson
Neocognitron	Recognition of characters manuscripts	Easy conceptualize. Insensitive to the translation, rotation and scale	It requires many elements of process, levels and connections	1978	Fukushima
Self-Organizing-Map (SOM)	Recognition of patterns, coding data optimization	Make maps features common of cough learned data	It requires a lot training	1980	Kohonen
Hopfield	Reconstruction patterns and optimization	Can be implemented in VLSI	Capacity and stability	1982	Hopfield
Machines Boltzmann and Cauchy	Recognition patterns (images, sound and radar). Optimization	Simple networks. Capacity of representation optimal patterns	The machine of Bolzmann need a very long time learning	1985	Hinton
Associative memory bi-directional	Memory heteroasociativa access by content.	Learning and simple architecture	Low capacity storage. The data should be encoded	1985	Kosko
Adaptive resonance theory (ART)	Recognitionpatterns (radar, (sonar, etc.)	Sophisticated, little used	Sensitive to the translation, distortion and scale	1986	Carperrter, Grossberg
Counterpropagation	Understanding images	Combination of Perceptron and TPM	Many neurons and connections	1986	Hectnielsen
Back-propagation (BP)	Voice synthesis from text. Control robots. Forecast Recognition patterns	The most popular network. Numerous applications successfully. Ease of learning. Powerful.	It needs a lot of time for the learning and many examples	1986	Werbos, Parker, Rumelhart

- The direction of the information flow through the layers. The connectivity between the nodes of a neural network is related with the way in which the exits of neurons are directed to become into entrances other neurons. The output signal of a node can be one of the entrances another element of process, or even be an entrance to it. When any output of the neurons is input of neurons of the same level or preceding levels, the network is described as feedforward. By the contrary, if there is at least one connected exit as entrance of neurons of previous levels or of the same level, including themselves, the network is denominated of feed-back. The feedback networks that have at least a closed loop of back propagation are called recurrent.

3.4. Process of Learning

Learning ANN consists in determining precise values of weights for all connections, all trained for the efficient resolution of a problem. During the training session, the weights converge gradually to the values that make each entry to produce the desired output vector [3].

The end of the learning period can be determined:

- using a number fixed cycles,
- when the error falls below a preset amount,
- when the modification of the weights is irrelevant.

Depending on the scheme of learning and the problem to be solved, three types of learning schemes can be distinguished [4]:

- Supervised learning. In the supervised knowledge the training is controlled by an external agent (supervisor, teacher), which watches the answer that the network is supposed to generate from a determined entrance. The supervisor compares the output of the network with the expected one and determines the amount of the modification to be made in the weight. The objective is to decrease the difference between the answer of the network and the desired values. For example the ANN that uses this type of learning is Adaline, MPL, BP, and Associative Memory Bi-directional.
- Unsupervised learning. The ANNs with unsupervised learning (also known as self-supervised) do not require any external element to adjust the weight of the communication links to their neurons. The main problem in the unsupervised classification is to divide the space where the objects are in groups or categories. The ANN that use this type of learning are Hopfield, Machines Boltzmann and Cauchy, networks with competitive learning, such as SOM and ART.

4. ANN: Models, Characteristics, Architecture, Learning

The development of a successful ANN project has to be constituted for a number of stages, as illustrated in Figure 3.

4.1. Problem Definition and Formulation

In the first phase, the problem has to definite. There exist engineering problems for which finding the perfect solution requires a practically impossible amount of resources and an acceptable solution would be fine. ANNs can give good solutions for such classes of problems.

4.2. System Design

In order to select a good NN configuration, there are several factors to take into consideration. The major points of interest regarding the ANN topology selection are related to network design, training, and practical considerations. Some of the design considerations include determining the number of input and output nodes to be used, the number of hidden layers in the network and the number of hidden nodes used in each hidden layer. The number of input nodes is typically taken to be the same as the number of state variables. The number of output nodes is typically the number that identifies the general category of the state of the system. Each node constitutes a processing element and it is connected through various weights to other elements. In order to predict with the least possible error, these values must be optimized.

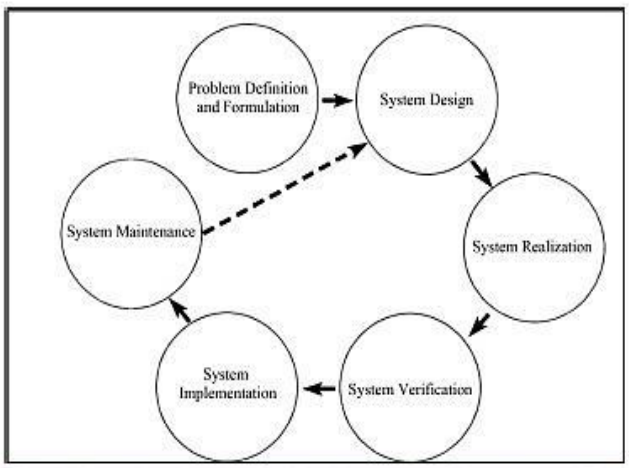


Figure 3. The various phases in an ANN development project. These stages are fundamental to right performance of ANN (own elaboration).

The data must be enough big to cover the possible known variation in the problem domain. This database into three subsets for training-test and validation. The samples that compose the input and output must have the same format and must be normalized in the range 0 or 1 or −1 to 1 depending on the transfer function used. The initial weights of an NN play a significant role in the convergence of the training method. Knowing input data and output data and objects obtain, we can design ANN. First there was to choose to type of ANN and once defined the topology of the ANN it is required to establish algorithm that allow an adequation of the inner parameters of the network.

4.3. System Realization

System realization involves one of two basic steps, training/learning. In this training step, the connection parameters were adjusted with training function showed in Table 1, such that, for the given dataset the neural network-predicted output dataset matched with real output dataset. The training step is influence for various parameters (network size, learning rate, number of training cycles, acceptable error, etc.) can affect the design and error of the final network. For this, we must considered determining the input and output variables, choosing the size of the training data set, initializing network weights, choosing training parameter values (such as learning rate and momentum rate), and selecting training stopping criteria, are important for several network topologies. In function of ANN type we choose of type supervised or not supervised learning. The number of training examples used to train an ANN is sometimes critical to the success of the training process. If the number of training examples is not sufficient, then the network cannot correctly learn the actual input-output relation of the system. If the number of training examples is too large, then the network training time will be longer. For some applications, such as real-time adaptive neural control, training time is a critical.

4.4. System Verification

Verification is intended to confirm the capability of the ANN based model to respond accurately to examples never used in network development. This stage includes comparing the performance of ANN based model to those of other approaches. For each training function, the matrix of weight must be optimized in its respective learning process. In the verification process, the obtained data by ANN must be compared with the real ones to optimize the parameters of the ANN by statistical tools. The testing/validation process is the final stage of the work. When all ANN parameters are optimized, the validation process is only used to test them.

4.5. System Implementation

This phase includes embedding the obtained network in appropriate working system such as hardware controller or computer program, depending of the function have ANN, such as, optimization process or control process or predict on-line. Final testing of the integrated system should also be carried out before its release to the end user.

4.6. System Maintenance

This stage includes update of the medium, changes in variables, new data that influence the development of the network.

5. Applications of Neural Networks

The ANNs are an emerging computer technology that can be used in a large number and variety of applications such as, control, monitoring and modeling, recognition, detection an research for patterns, predicts on-line, image processing, optimization and signal processing. This applications can use in several fields as production of manufacturing, agriculture…, business, marketing, medicine, transports, energy, trade the greater, etc… In this paper, we can see some examples, what use has artificial neural network in different food industry.

5.1. Control, Monitoring and Modeling of Industrials Processes

At present, the industry has a number of objectives: improve of quality products, reducing of waste, elimination of toxins, and above all the increase of the benefits. The industry has also to be efficient. For this reason neural networks are implanted in control, modeling and monitoring of existing industrial processes, thus reducing costs

process and increasing the outputs, as it can be seen at the various articles referenced in the Table 3.

5.2. Recognition, Detection, Classification and Search for Patterns

The ANNs are used for recognition, detection, classification and search for patterns, e.g., for classification of seeds or apples in real time through digital images, analyzing texture and color. Besides defect detection on cherries or pattern recognition of fruit shape quantitatively between others as the Table 4 incanted.

5.3. Prediction On-Line Parameters

Predicting the behavior of an even which depends from the time, with base in a group of values that are obtained from different moments. In food industries, the ANNs are very used, overall for predict on-line quality and characteristics of food, parameters of elaboration process, prediction temperatures for food storage. The Table 5 shows some applications of ANN in food industry and kind of ANN used.

5.4. Image Processing

More than 200 applications of neural networks in image processing and discuss the present and possible future role of neural networks, especially feed-forward neural networks, Kohonen feature maps and Hopfield neural networks. The various applications are used in different industries, for example in forest industry or clothe industry to see defects of raw material and final product. In food industry, the image processing method has become very popular and indirectly used to determine the sugar content of fruits. For example, high correlation coefficients have been obtained between the sugar content and the red value in the chromatic coordinates of banana peels [59] or the application of ANN to the color grading of apples [60].

Table 3. Several examples of application of control, monitoring and modelling of industrial process (own elaboration).

Sample	Object of investigation	Type of ANN	References
Food in general	Modeling and control of a food extrusion process using ANN	BP	Popescu *et al.*, (2001) [5]
	Modeling sterilization process of canned foods ANNs	BP	Gonçalves, *et al.*, (2005) [6]
	Prediction models and for optimization of constant temperature retort (CRT) thermal processing of conduction heating foods using ANN.	Non defined	Chen, and Ramaswamy, (2002) [7]
	Application of ANN in the modelling of the thermal treatment of food	RNN, BP	Luera Peña, Minim, (2001) [8]
Apple	ANN modeling of apple drying process.	MLPFF	Khoshhal, *et al.*, (2010) [9]
Apple juice	Modeling dead-end ultrafiltration of apple juice using ANN	MLPFF, BP	Gökmen, *et al.*, (2009) [10]
Bread	Dynamic model of the kneading process based on ANN that allows predicting the bread dough temperature and the delivered power	RNN	Lamrini, *et al.*, (2012) [11]
Lime	ANN modeling of mass transfer during osmotic dehydration of kaffir lime peel.	MLPFF	Lertworasirikul, Saetan, (2010) [12]
Squid protein	Modeling of squid protein hydrolysis using ANN	MLP	Abakarov, *et al.*, (2011) [13]
Tomato	Modeling of tomato drying using ANN	MLP	Movaghamejad, Nikza, (2007) [14]
Viscous fluids	Neural network modeling of end-over-end thermal processing of particulates in viscous fluids	MLP BP	Meng and Ramaswamy, (2010) [15]
Wheat	Modeling of wheat soaking using two ANNs	MLP, RBF	Kashaninejad, (2009) [16]
Wine	Modeling wine characteristics using ANN	MLPFF, BP	Vlassides, *et al.*, (2001) [17]

Table 4. Several examples of application of recognition, detection, classification and research for patterns (own elaboration).

Sample	Object of investigation	Type of ANN	References
Apple	Develop ANN-based apple classifier	MLP, BP	Bhatt *et al.*, (2014) [18]
	Apple classification system based on machine vision and ANN, which classifies apple in real time on the basis of physical parameters of apple such as size, color and external defects.	MLP, BP	Bhatt and Pant, (2013) [19]
	Classification of apple surface features using machine vision and ANN	MLPFF	Yang, (1993) [20]
Beans	Classification of beans using computer vision system and ANNs	MLPFF	Kılıc *et al.*, (2007) [21]
Boiled shrimp	Classifications of boiled shrimp's shape using image analysis and ANN model.	MLP	Poonnoy *et al.*, (2014) [22]
Cherries	Use of genetic artificial neural networks and spectral imaging for defect detection on cherries	MLPFF, BP	Guyer and Xiukun Yang, (2000) [23]
Food in general	A new pattern recognition method for detecting fouling on stainless steel is presented in food processing.	MLPFF, BP	Wallhäußer *et al.*, (2011) [24]
Fruits	Pattern recognition of fruit shape quantitatively with ANN	SOM	Morimoto *et al.*, (2000) [25]
Grape	Determination of anthocyanin concentration in whole grape skins using hyperspectral imaging and adaptive boosting ANN	MLPFF	Fernandes *et al.*, (2011) [26]
Lamb	Classification according to prediction the lamb carcass grades using features extracted from lamb chop images	MLP	Chandraratne *et al.*, (2007) [27]
Pig muscles	Duroc and Iberian pork neural network classification by visible and near infrared reflectance spectroscopy	RBF	Del Moral. *et al.*, (2009) [28]
The starch of potato, cassava, corn	Classify the data set and to predict mechanical properties (tensile strength and strain at break of starch-based films using ANN	MLPFF	Dieulot and Skurtys, (2013) [29]
Wine	Prediction of problematic wine fermentations using ANN	MLP, BP	Román *et al.*, (2011) [30]

5.5. Optimization

In general, the objective in optimization is to allocate a limited amount of resources to a set of certain partial tasks such that some objective or costs function is minimized (or maximized). A great number of variables usually enter the problem, and to evaluate and minimize the objective function, a combinatorial problem has to be solved. In the Table 6 we can be observed some examples of optimization of elaboration process conditions of food or optimization of storage conditions of vegetables and fruits between others.

5.6. Signal Processing

From a signal processing perspective, it is imperative to develop a proper understanding of basic neural network structures and how they impact signal processing algorithms and applications. A challenge in surveying the field of neural network paradigms is to identify those neural network structures that have been successfully applied to solve real world problems from those that are still under development or have difficulty scaling up to solve realistic problems. When dealing with signal processing applications, it is critical to understand the nature of the problem formulation so that the most appropriate neural network paradigm can be applied. In addition, it is also important to assess the impact of neural networks on the performance, robustness, and cost-effectiveness of signal processing systems and develop methodologies for integrating neural networks with other signal processing algorithms. Because of the ANN are used in different fields and industries. In food industry, we can find several researches. One of all develops two-way classification models using ANN to classify the stored beef meat samples into two groups: "unspoiled" and "spoiled"; based on the microbial population as alternative to electronic noise [67].

6. Applications in Field of the Olive Oil

In this field, the artificial neural networks have different applications: to classify the olive fruit for their

Table 5. Several examples of application prediction on-line parameters (own elaboration).

Sample	Object of investigation	Type of ANN	References
Agricultural products	ANN method to predict the drying characteristics of agricultural products such as hazelnut, bean and chickpea	MLPFF, BP	Topuz (2010) [31]
Carrot	Predicting properties of dried carrot based on composition, drying technique, and microstructural features	p	Kerdpiboon, *et al.*, (2006) [32]
Cheese	Predicting the final process time in the acidification step for cheese production.	p	Jun-ichiHoriuchi, *et al.*, (2004) [33]
Chicken	Predicting the final temperature of chicken carcasses in an industrial scale using ANN	MLPFF, BP	Silveira, *et al.* (2014) [34]
Chicken nuggets	Developing a model to predict the mechanical textural properties of the fried breaded chicken nuggets by using image texture processing	MLPFF	Qiao *et al.*, (2007) [35]
Corn	Artificial neural networks to predict corn yield	MLPFF, BP	Uno *et al.*, (2005) [36]
Crackers	Moisture content and water activity prediction of semi-finished cassava crackers from drying process with ANN	MLPFF	Lertworasirikul and Tipsuwan, (2008) [37]
Fresh outcrop milk cream	Discriminating season of production and feeding regimen of butters based on infrared spectroscopy and ANN	MLP	Gori *et al.*, (2012) [38]
Food in general	Predicting of cold spot temperature in retort sterilization of starch-based foods	BP	Llave *et al.*, (2012) [39]
	Predicting the internal texture characteristics from extrusion food surface images with ANN	MLPFF, BP	Fan *et al.*, (2013) [40]
	Predicting of thermal conductivity of food as a function of moisture content, temperature and apparent porosity.	MLPFF, BP	Sablani, and Rahman, (2003) [41]
Grain	Predicting the moisture content of grain drying process using genetic algorithm	BP, RBF	Liu, *et al.*, (2007) [42]
Ice cream	Predicting total acceptance of ice cream using ANN	MLPFF	Bahramparvar, *et al.*, (2013) [43]
Meal of beef	Predicting shrinkage of ellipsoid beef joints as affected by water immersion cooking using image analysis and ANN	BP	Zheng *et al.*, (2007) [44]
Molasses vinegar	Prediction by ANN of the physicochemical quality of cane molasses vinegar by time-temperature effect of food to flash evaporator-distiller	MLPFF, BP	Vàsquez and Lescano, (2010) [45]
Oils	ANN as an alternative to other methods utilized to determine the fatty acid composition of oils.	MLPFF	Yalcin *et al.*, (2012) [46]
Orange juice	Predicting physical properties of orange juice powder as well as process parameters in spray dryers.	MLPFF	Chegini *et al.*, (2008) [47]
Orange, peach, pear	Predicting of viscosity of fruit juice as a function of concentration and temperature.	MLP	Rai *et al.*, (2005) [48]
Peas	Predicting maturity index peas with ANN	MLP	Higginsa *et al.*, (2010) [49]
Peppers	Predicting of storage quality of fresh-cut green peppers using ANN	MLPFF, BP	Meng, *et al.*, (2012) [50]
Processing food in general	Predicting process parameters involved in thermal/pressure food processing using ANN	BP	Torrecilla *et al.*, (2004) [51]
Plum juice	Predicting the permeate flux of red plum juice during membrane clarification	MLPFF	Nourbakhsh *et al.*, (2014) [52]
Seeds	Predicting deoxynivalenol accumulation in barley seeds contaminated with Fusariumculmorum under different conditions	MLP, RBF	Mateo *et al.*, (2011) [53]

Continued

Viscous non-Newtonian fluid food	Apply the ANN to predict the pressure gradients in tube flow of viscous non-Newtonian fluid foods.	BP	Adhikari and Jindal (2000) [54]
Wheat flour	Predicting the correlation between farinographic properties of wheat flour dough and its chemical composition	MLPFF	Razmi-Rad *et al.*, (2007) [55]
	Prediction of extensograph properties of wheat-flour dough: ANN	MLPFF	Abbasi *et al.*, (2012) [56]
Wine	Predicting the sensorial qualities of wines	SOM	Curvelo *et al.*, (2010) [57]
Yacon	Prediction by ANN of the diffusivity, mass, moisture, volume and solids on osmotically dehydrated yacon	MLPFF, BP	Rojas and Vásquez, (2012) [58]

Table 6. Several examples of application optimization (own elaboration).

Sample	Object of investigation	Type of ANN	References
Corn germ	Modeling syrup production process from defatted corn germ	MLPFF BP	Millán and Gil, (2011) [61]
Food in general	Design and optimize high-pressure food processes	MLPFF BP	Torrecilla *et al.*, (2005), (2007) [62] [63]
Foodstuffs	Optimization the operating conditions on heat and mass transfer during foodstuffs drying	MLPFF	Hernández, (2009) [64]
Fruit	Optimization of heat treatment for fruit during storage using ANN	MLPFF	Morimoto *et al.*, (1997) [65]
	Realizing the optimal control of the fruit-storage process.	MLPFF	Morimoto *et al.*, (1997) [66]

processing, to test the ripeness of fruit, to detect frauds or adulterations in the olive oils or to predict the characteristic of olive oil obtained and to optimize the extraction process of olive oil.

For example, ANN was employed to fruit classification according to olive cultivar, as a tool to guarantee varietal authenticity. In this study, six olive cultivars of Trás-os-Montes region were collected in different groves and during four crop years. Ten biometrical parameters were measured and used for the linear discriminant analysis (LDA) and ANN classification model development. In this work, single MPLFF classification networks, trained using a supervised learning algorithm was used. The MLP methodology demonstrated to be a practical and effective tool for olive cultivar classification, showing high global sensitivity and specificity, even for unknown samples (76% and 78% for the validation data set, respectively). With this work between others, the olive oil producers can use to prevent possible olive oil adulterations with olives of non-allowed cultivars, according to the Protected Designation of Origin (DPO) or monovarietal olive oil's official regulation [68].

Other investigation described a novel method for rapid, automatic and objective prediction of the ripening index of an olive lot [69]. The method used integrates a Machine Vision system, capable of performing a color-based raw prediction of ripening index, with an ANN based algorithm to refine it. Such a refinement was based on a set of chemical parameters (oil content, sugar content and phenol content) which were provided as input to the ANN and which can be obtained by historical curves for the region where the ripening index needs to be predicted. The training of ANN was carried out using rule based on the gradient descent BP algorithm with an adaptive learning rate. For other part, FFBP with Levenberg-Marquardt algorithm is used by Ram *et al.*, (2010) to predict the quantity oil together with model linear regressions (MLR). Both based on quality features derived from known image processing algorithms [70]. The ANNs were more accurate than linear regression, resulting in average linear correlations for two varieties of olives.

Due to the most recent changes in purchasing behavior of consumers are markedly affected by the increasing consumer's interest in a reliable geographical declaration of foods. As regards virgin olive oils, this information is deemed an additional warranty of their quality, authenticity, typicality and safety. For this purpose, Garcia-Gonzalez D. *et al.*, (2009) proposed a new methodology based on MLP, a form of ANN that has been applied to the main series of compounds analyzed in oils to identify the geographical origin of virgin olive oil for this time [71]. This work made a classification function of country, region, province and PDO. Torrecilla *et al.*, (2013)

joined to classification of extra virgin olive oils (EVOO) used ANN. This classification was made inside PDO with its owns olive oils. For this purpose, they used as input several parameters, such as, acidity, peroxide index, K_{232}, K_{270}, ΔK, moisture and volatile compounds. With this research we can observed the capability of supervised ANN models with smaller topologies to classify very similar EVOO samples, also these techniques can be applied to detect adulterations [72]. These researchers used a self-organizing map (SOM) to classify the aforementioned UV-vis signals from pure EVOO and adulterated samples with different additives and signals of pure EVOO with addition of two different types of noises. This can be a tool to detect adulterations although it still requires an optimization. This type of ANN was used by Marini *et al.*, (2007) together with a MLPFF [73]. Zupan *et al.*, (1994) already used ANN to classify olive oils. The classification was performed on analysis of eight fatty acids of Italian olive oils. In this research, BP and Kohonen were compared with prediction approximated 95% [74].

ANNs also have other function inside olive oil field, such as, inside extraction process of olive oil. Furferi *et al.*, 2007, 2008, development artificial neural network to predict of the two parameters: acidity level and peroxides of olive oil extracted by a continuous extraction process. Thus, allowing a real-time control of oil quality during the extraction process. BP was used on two different neural network referring to a 3 phases and 2 phases decanting technology which results obtained were acceptable [75] [76].

On the other hand, ANNs are an adequate tool to estimate the concentration of phenolic compounds, a pollutant with a high environmental impact in olive oil mill wastewater, without any previous phenological knowledge [77]. The type of ANN used in this work is a BP with feed-forward connections between neurons or back connections with a prediction horizon and supervised learning. The ANNs developed and optimized was able to predict the caffeic acid concentration value in a waste stream from olive oil extraction. This research had important results because the difference between the real and the predicted values was about 5%. In other study performed by the same investigators, an integrated artificial neural network (ANN)/laccase biosensor is designed to prediction of cathecol concentration of olive oil mill wastewater. The obtained results gave difference between the real and the predicted values less than 1% [78].

Other researchers as Bordons and Cueli in (2004) intended to find an application of a predictive controller that deals with measurable disturbances in extraction process in an olive oil mill. This research was focused on the thermal part of the process and it shown the combination of experimental results with validated results. This work didn't use ANN as tool of work but we can observe as if other researchers used this tool for elaboration process optimization [79]. This is the case of Jiménez *et al.*, 2008, 2009 [2] [80]. In this work the authors built an ANN for real-time prediction of the moisture and fat content in olive pomace using two-phase olive oil processing. With help of AOTF-NIR system that obtained the oil spectrum from horizontal decanter and data analysis, they development an ANN based on the BPFF. These ANN's predictions can be performed quickly during the extraction process, allowing a rapid regulation of technological variables for minimal fat loss.

7. Conclusion

In this review the reader can introduce principal characteristics and the ANN's creation process in the ANN's world. Although the fundamental conclusion is numerous applications that ANNs have as we can observe in this review. In some field the ANNs can be used for their enormous advantages, over all for their ability to learn from examples make them efficient problem solving paradigms. Older artificial neural networks have limitations that should not be overlooked, the interest in ANN's field continues growing and optimizing better for solving, controlling or modeling all class of problems that can appear.

Acknowledgements

This work is supported by excellence project of Junta de Andalucía, "Modeling and optimization of the process of elaboration of virgin olive oil. Project" I. and it is a preliminary work of E.F.'s PhD thesis.

Conflict of Interest

The authors have declared no conflict of interest.

References

[1] Basheer, I.A. and Hajmeer, M. (2000) Artificial Neural Networks: Fundamentals, Computing, Design, and Application.

Journal of Microbiological Methods, **43**, 3-31. http://dx.doi.org/10.1016/S0167-7012(00)00201-3

[2] Jiménez, A., Aguilera, M.P., Uceda, M. and Beltrán, G. (2009) Neural Network as Tool for Virgin Olive Oil Elaboration Process Optimization. *Journal of FoodEngineering*, **95**, 135-141. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2009.04.021

[3] BasogainOlabe, X. (2005) Artificial Neural Networks and Their Applications. School of Engineering, Bilbao.

[4] Matich, D.J. (2001) Neural Networks: Basic Concepts and Applications. National University of Technology—Faculty Regional Rosario. Group of Applied Research in the Chemical Engineering (GIAIQ).

[5] Popescu, O., Popescu, D., Wilder, J. and Karwe, M. (2001) A New Approach to Modelling and Control of a Food Extrusion Process Using Artificial Neural Network and an Expert System. *Journal of Food Process Engineering*, **24**, 17-36. http://dx.doi.org/10.1111/j.1745-4530.2001.tb00529.x

[6] Gonçalves, E.C., Minim, L.A., Coimbra, J.S.R. and Minim, V.P.R. (2005) Modeling Sterilization Process of Canned Foods Using Artificial Neural Networks. *Chemical Engineering and Processing*, **44**, 1269-1276. http://dx.doi.org/10.1016/j.cep.2005.04.001

[7] Chen, C.R. and Ramaswamy, H.S. (2002) Modeling and Optimization of Constant Retort Temperature (CRT) Thermal Processing Using Coupled Neural Networks and Genetic Algorithms. *Journal of Food Process Engineering*, **25**, 351-379. http://dx.doi.org/10.1111/j.1745-4530.2002.tb00571.x

[8] Luera Peña, W.E. and Minim, L.A. (2001) Application of Neural Networks in the Modelling of the Thermal Treatment of Food. *LWT-Food Science and Technology*, **3**, 81-88.

[9] Khoshhal, A., Dakhel, A., Etemadi, A. and Zereshk, S. (2010) Artificial Neural Network Modeling of Apple Drying Process. *Journal of Food Process Engineering*, **33**, 298-313. http://dx.doi.org/10.1111/j.1745-4530.2009.00435.x

[10] Gökmen, V., Açar, O.C., Serpen, A. and Süğüt, I. (2009) Modeling Dead-End Ultrafiltration of Apple Juice Using Artificial Neural Network. *Journal of FoodProcessEngineering*, **32**, 248-264. http://dx.doi.org/10.1111/j.1745-4530.2007.00214.x

[11] Lamrini, B., Della Valle, G., TreleaPerrot, I.C. and Trystram, G. (2012) A New Method for Dynamic Modeling of Bread Dough Kneading Based on Artificial Neural Network. *Food Control*, **26**, 512-524.

[12] Lertworasirikul, S. and Saetan, S. (2010) Artificial Neural Network Modeling of Mass Transfer during Osmotic Dehydration of Kaffir Lime Peel. *Journal of Food Engineering*, **98**, 214-223.

[13] Abakarov, A., Teixeira, A., Simpson, R., Pinto, M. and Almonaci, S. (2011) Modeling of Squid Protein Hydrolysis: Artificial Neural Network Approach. *Journal of Food Process Engineering*, **34**, 2026-2046. http://dx.doi.org/10.1111/j.1745-4530.2009.00567.x

[14] Movagharnejad, K. and Nikzad, M. (2007) Modeling of Tomato Drying Using Artificial Neural Network. *Computers and Electronics in Agriculture*, **59**, 78-85. http://dx.doi.org/10.1016/j.compag.2007.05.003

[15] Meng, Y. and Ramaswamy, H.S. (2010) Neural Network Modeling of End-over-End Thermal Processing of Particulates in Viscous Fluids. *Journal of Food Process Engineering*, **33**, 23-47. http://dx.doi.org/10.1111/j.1745-4530.2008.00272.x

[16] Kashaninejad, M., Dehghani, A.A. and Kashiri, M. (2009) Modeling of Wheat Soaking Using Two Artificial Neural Networks (MLP and RBF). *Journal of Food Engineering*, **91**, 602-607. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2008.10.012

[17] Vlassides, S., Ferrier, J.G. and Block, D.E. (2001) Using Historical Data for Bioprocess Optimization: Modeling Wine Characteristics Using Artificial Neural Networks and Archived Process Information. *Biotechnology and Bioengineering*, **73**, 55-68. http://dx.doi.org/10.1002/1097-0290(20010405)73:1<55::AID-BIT1036>3.0.CO;2-5

[18] Bhat, A.K. (2014) An Analysis of the Performance of Artificial Neural Network Technique for Apple Classification. *AI & Society*, **29**, 103-111. http://dx.doi.org/10.1007/s00146-012-0425-z

[19] Bhatt, A.K. and Pant, D. (2013) Automatic Apple Grading Model Development Based on Back Propagation Neural Network and Machine Vision, and Its Performance Evaluation. *AI & Society*, **30**, 45-56.

[20] Yang, Q. (1993) Classification of Apple Surface Features Using Machine Vision and Neural Networks. *Computers and Electronics in Agriculture*, **9**, 1-12. http://dx.doi.org/10.1016/0168-1699(93)90025-V

[21] Kılıç, K., Boyaci, H.I., Koecsel, H. and Kuesmenoglu, I. (2007) A Classification System for Beans Using Computer Vision System and Artificial Neural Networks. *Journal of Food Engineering*, **78**, 897-904. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2005.11.030

[22] Poonnoy, P., Yodkeaw, P., Sriwai, A., Umongkol, P. and Intamoon, S. (2014) Classification of Boiled Shrimp's Shape Using Image Analysis and Artificial Neural Network Model. *Journal of Food Process Engineering*, **37**, 257-263.

[23] Guyer, D. and Yang, X. (2000) Use of Genetic Artificial Neural Networks and Spectral Imaging for Defect Detection on Cherries. *Computers and Electronics in Agriculture*, **29**, 179-194. http://dx.doi.org/10.1016/S0168-1699(00)00146-0

[24] Wallhäußer, E., Hussein, W.B., Hussein, M.A., Hinrichs, J. and Becker, T.M. (2011) On the Usage of Acoustic Properties Combined with an Artificial Neural Network—A New Approach of Determining Presence of Dairy Fouling. *Journal of Food Engineering*, **103**, 449-456. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2010.11.015

[25] Morimoto, T., Takeuchi, T., Miyata, H. and Hashimoto, Y. (2000) Pattern Recognition of Fruit Shape Based on the Concept of Chaos and Neural Networks. *Computers and Electronics in Agriculture*, **26**, 171-186. http://dx.doi.org/10.1016/S0168-1699(00)00070-3

[26] Fernandes, A.M., Oliveira, P., Moura, J.P., Oliveira, A.A., Falco, V., Correia, M.J. and Melo-Pinto, P. (2011) Determination of Anthocyanin Concentration in Whole Grape Skins Using Hyperspectral Imaging and Adaptive Boosting Neural Networks. *Journal of Food Engineering*, **105**, 216-226. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2011.02.018

[27] Chandraratne, M.R., Kulasiri, D. and Samarasinghe, S. (2007) Classification of Lamb Carcass Using Machine Vision: Comparison of Statistical and Neural Network Analyses. *Journal of Food Engineering*, **82**, 26-34. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2007.01.003

[28] Del Moral, F.G., Guillén del Moral, L.G., O'Vallea, F. and Martínez del Moral, R.G. (2009) Duroc and Iberian Pork Neural Network Classification by Visible and Near Infrared Reflectance Spectroscopy. *Journal of Food Engineering*, **90**, 540-547. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2008.07.027

[29] Dieulot, J.-Y. and Skurtys, O. (2013) Classification, Modeling and Prediction of the Mechanical Behavior of Starch-Based Films. *Journal of Food Engineering*, **119**, 188-195. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2013.05.028

[30] Román, C., Hernández, O.G. and Urrubia, U.A. (2011) Prediction of Problematic Wine Fermentations Using Artificial Neural Networks. *Bioprocess and Biosystem Engineering*, **34**, 1057-1065.

[31] Topuz, A. (2010) Predicting Moisture Content of Agricultural Products Using Artificial Neural Networks. *Advances in Engineering Software*, **41**, 464-470. http://dx.doi.org/10.1016/j.advengsoft.2009.10.003

[32] Kerdpiboon, S., Kerr, W. and Devahastin, S. (2006) Neural Network Prediction of Physical Property Changes of Dried Carrot as a Function of Fractal Dimension and Moisture Content. *Food Research International*, **39**, 1110-1118. http://dx.doi.org/10.1016/j.foodres.2006.07.019

[33] Horiuchi, J., Shimada, T., Funahashi, H., Tada, K., Kobayashi, M. and Kanno, T. (2004) Artificial Neural Network Model with a Culture Database for Prediction of Acidification Step in Cheese Production. *Journal of Food Engineering*, **63**, 459-465. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2003.09.005

[34] Silveira, C., Belledeli, B.D., Soares, M.B.A., Treichel, H. and Mazutti, M.A. (2014) Use of Artificial Neural Network for Industrial Prediction of Final Temperature of Chicken Carcasses. *Journal of Food Process Engineering*, **37**, 1-9. http://dx.doi.org/10.1111/jfpe.12053

[35] Qiao, J., Wang, N., Ngadi, M.O. and Kazemi, S. (2007) Predicting Mechanical Properties of Fried Chicken Nuggets Using Image Processing and Neural Network Techniques. *Journal of Food Engineering*, **79**, 1065-1070. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2006.03.026

[36] Uno, Y., Prasher, S.O., Lacroix, R., Goel, P.K., Karimi, Y., Viau, A. and Patel, R.M. (2005) Artificial Neural Networks to Predict Corn Yield from Compact Airborne Spectrographic Imager Data. *Computers and Electronics in Agriculture*, **47**, 149-161. http://dx.doi.org/10.1016/j.compag.2004.11.014

[37] Lertworasirikul, S. and Tipsuwan, Y. (2008) Moisture Content and Water Activity Prediction of Semi-Finished Cassava Crackers from Drying Process with Artificial Neural Network. *Journal of Food Engineering*, **84**, 65-74. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2007.04.019

[38] Gori, A., Cevoli, A., Fabbri, A., Cavoni, M.F. and Losi, G. (2012) A Rapid Method to Discriminate Season of Production and Feeding Regimen of Butters Based on Infrared Spectroscopy and Artificial Neural Networks. *Journal of Food Engineering*, **109**, 525-530. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2011.10.029

[39] Llave, Y.A., Hagiwara, T. and Sakiyama, T. (2012) Artificial Neural Network Model for Prediction of Cold Spot Temperature in Retort Sterilization of Starch-Based Foods. *Journal of Food Engineering*, **109**, 553-560. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2011.10.024

[40] Fan, F.H., Ma, Q., Ge, J., Peng, Q.Y., William, W. and Riley, T.S.Z. (2013) Prediction of Texture Characteristics from Extrusion Food Surface Images Using a Computer Vision System and Artificial Neural Networks. *Journal of Food Engineering*, **118**, 426-433. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2013.04.015

[41] Sablani, S.S. and ShafiurRahman, M. (2003) Using Neural Networks to Predict Thermal Conductivity of Food as a Function of Moisture Content, Temperature and Apparent Porosity. *Food Research International*, **36**, 617-623. http://dx.doi.org/10.1016/S0963-9969(03)00012-7

[42] Liu, X., Chen, X., Wu, W. and Peng, G. (2007) A Neural Network for Predicting Moisture Content of Grain Drying Process Using Genetic Algorithm. *Food Control*, **18**, 928-933. http://dx.doi.org/10.1016/j.foodcont.2006.05.010

[43] Bahramparvar, M. (2013) Predicting Total Acceptance of Ice Cream Using Artificial Neural Network. *Journal of Food Processing and Preservation*, **38**, 1080-1088.

[44] Zheng, C., Sun, D.W. and Zheng, L. (2007) Predicting Shrinkage of Ellipsoid Beef Joints as Affected by Water Immersion Cooking Using Image Analysis and Neural Network. *Journal of Food Engineering*, **79**, 1243-1249. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2006.04.010

[45] Vásquez, V. and Lescano, C. (2010) Prediction by Artificial Neural Networks of the Physicochemical Quality of Cane Molasses Vinegar by Time-Temperature Effect of Food to Flash Evaporator-Distiller. *Scientia Agropecuaria*, **1**, 63-73.

[46] Yalcin, H., Toker, O.S., Ozturk, I., Dogan, M. and Kism, O. (2012) Prediction of Fatty Acid Composition of Vegetable Oils Based on Rheological Measurements Using Nonlinear Models. *European Journal of Lipid Science and Technology*, **114**, 1217-1224. http://dx.doi.org/10.1002/ejlt.201200040

[47] Chegini, G.R., Khazaei, J., Ghobadian, B. and Goudarzi, A.M. (2008) Prediction of Process and Product Parameters in an Orange Juice Spray Dryer Using Artificial Neural Networks. *Journal of Food Engineering*, **84**, 534-543. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2007.06.007

[48] Rai, P., Majumdar, G.C., DasGupta, S. and De, S. (2005) Prediction of the Viscosity of Clarified Fruit Juice Using Artificial Neural Network: A Combined Effect of Concentration and Temperature. *Journal of Food Engineering*, **68**, 527-533. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2004.07.003

[49] Higginsa Di Prestwidge, A., Stirling, D. and Yost, J. (2010) Forecasting Maturity of Green Peas: An Application of Neural Networks. *Computers and Electronics in Agriculture*, **70**, 151-156. http://dx.doi.org/10.1016/j.compag.2009.09.018

[50] Meng, X., Zhang, M. and Adhikari, B. (2012) Prediction of Storage Quality of Fresh-Cut Green Peppers Using Artificial Neural Network. *International Journal of Food Science and Technology*, **47**, 1586-1592. http://dx.doi.org/10.1111/j.1365-2621.2012.03007.x

[51] Torrecilla, J.S., Otero, L. and Sanz, P.D. (2004) A Neural Network Approach for Thermal/Pressure Food Processing. *Journal of Food Engineering*, **62**, 89-95. http://dx.doi.org/10.1016/S0260-8774(03)00174-2

[52] Nourbakhsh, H., Emam-Djomeh, Z., Omid, M., Mirsaeedghazi, H. and Moini, S. (2014) Prediction of Red Plum Juice Permeate Flux during Membrane Processing with ANN Optimized Using RSM. *Computers and Electronics in Agriculture*, **102**, 1-9. http://dx.doi.org/10.1016/j.compag.2013.12.017

[53] Mateo, F., Gadea-Gironés, R., Mateo, E.M. and Jiménez, M. (2011) Multilayer Perceptron Neural Networks and Radial-Basis Function Networks as Tools to Forecast Accumulation of Deoxynivalenol in Barley Seeds Contaminated with *Fusarium culmorum*. *Food Control*, **22**, 88-95. http://dx.doi.org/10.1016/j.foodcont.2010.05.013

[54] Adhikari, B. and Jindal, V.K. (2000) Artificial Neural Networks: A New Tool for Prediction of Pressure Drops of Non-Newtonian Fluid Foods through Tubes. *Journal of Food Engineering*, **46**, 43-51.

[55] Razmi-Rad, E., Ghanbarzadeh, B., Mousavi, S.M., Emam-Djomeh, Z. and Khazae, J. (2007) Prediction of Rheological Properties of Iranian Bread Dough from Chemical Composition of Wheat Flour by Using Artificial Neural Networks. *Journal of Food Engineering*, **81**, 728-734. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2007.01.009

[56] Abbasi, H., Mahdi, S., Ardabili, S., Emam-djomeh, Z., Mohammadifar, M., Zekri, M. and Aghagholizadeh, A. (2012) Prediction of Extensograph Properties of Wheat-Flour Dough: Artificial Neural Networks and a Genetic Algorithm Approach. *Journal of Texture Studies*, **43**, 326-337. http://dx.doi.org/10.1111/j.1745-4603.2011.00342.x

[57] Curvelo, J.C., Dias, G., Rrodrigues de souza, R. and Tambourgi, E. (2010) Applying of Neural Network on the Wine Sensorial Analysis from Barbados Cherry. *Journal of Food Process Engineering*, **33**, 365-378. http://dx.doi.org/10.1111/j.1745-4530.2009.00521.x

[58] Rojas Naccha, J. and Vásquez Villalobos, V. (2012) Prediction by Artificial Neural Networks (ANN) of the Diffusivity, Mass, Moisture, Volume and Solids on Osmotically Dehydrated Yacon (*Smallantus sonchifolius*). *Scientia Agropecuaria*, **3**, 201-214.

[59] Nakano, K., Kurata, K. and Kaneko, M. (1991) Effects of Alcohol Treatment on Banana Ripening and Application of Image Processing to Colour Grade Measuring. *Journal Society Agriculture Structure*, **21**, 203-208.

[60] Nakano, K. (1997) Application of Neural Networks to the Color Grading of Apples. *Computers and Electronics in Agriculture*, **18**, 105-116. http://dx.doi.org/10.1016/S0168-1699(97)00023-9

[61] Millán, F. and Gil, L. (2011) Design and Optimization of an Artificial Neural Network for Modeling Syrup Production Process from Defatted Corn Germ. *Annals of the Metropolitan University*, **11**, 177-190.

[62] Torrecilla, J.S., Otero, L. and Sanz, P.D. (2005) Artificial Neural Networks: A Promising Tool to Design and Optimize High-Pressure Food Processes. *Journal of Food Engineering*, **69**, 299-306. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2004.08.020

[63] Torrecilla, J.S., Otero, L. and Sanz, P.D. (2007) Optimization of an Artificial Neural Network for Thermal/Pressure Food Processing: Evaluation of Training Algorithms. *Computers and Electronics in Agriculture*, **56**, 101-110. http://dx.doi.org/10.1016/j.compag.2007.01.005

[64] Hernández, J.A. (2009) Optimum Operating Conditions for Heat and Mass Transfer in Foodstuffs Drying by Means of Neural Network Inverse. *Food Control*, **20**, 435-438. http://dx.doi.org/10.1016/j.foodcont.2008.07.005

[65] Morimoto, T., De Baerdemaeker, J. and Hashimoto, Y. (1997) Optimization of Heat Treatment for Fruit during Storage Using Neural Networks and Genetic Algorithms. *Computers and Electronics in Agriculture*, **19**, 87-101. http://dx.doi.org/10.1016/S0168-1699(97)00037-9

[66] Morimoto, T., De Baerdemaeker, J. and Hashimoto, Y. (1997) An Intelligent Approach for Optimal Control of Fruit-Storage Process Using Neural Networks and Genetic Algorithms. *Computers and Electronics in Agriculture*, **18**, 205-224. http://dx.doi.org/10.1016/S0168-1699(97)00030-6

[67] Balasubramania, S., Panigrahi, S., Loguec, C.M., Gub, H. and Marchello, M. (2009) Neural Networks-Integrated Metal Oxide-Based Artificial Olfactory System for Meat Spoilage Identification. *Journal of Food Engineering*, **91**, 91-98. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2008.08.008

[68] Peres, A.M., Baptista, P., Malheiro, R., Dias, L.G., Bento, A. and Pereira, J.A. (2011) Chemometric Classification of Several Olive Cultivars from Trás-os-Montes Region (Northeast of Portugal) Using Artificial Neural Networks. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **105**, 65-73. http://dx.doi.org/10.1016/j.chemolab.2010.11.001

[69] Furferi, R., Carfagni, M. and Daou, M. (2008) Real-Time Estimation of Olive Oil Quality Parameters: A Combined Approach Based on ANNs and Machine Vision. New Aspects of Computers Part: II. *Proceedings of the 12th WSEAS International Conference on Computers*, Iraklion, 23-25 July 2008, 387-392.

[70] Ram, T., Wiesman, Z., Parmet, I. and Edan, Y. (2010) Olive Oil Content Prediction Models Based on Image Processing. *Biosystems Engineering*, **105**, 221-232. http://dx.doi.org/10.1016/j.biosystemseng.2009.10.011

[71] García-González, D.L., Luna, G., Morales, M.T. and Aparicio, R. (2009) Stepwise Geographical Traceability of Virgin Olive Oils by Chemical Profiles Using Artificial Neural Network Models. *European Journal of Lipid Science and Technology*, **111**, 1003-1013. http://dx.doi.org/10.1002/ejlt.200900015

[72] Torrecilla, J.S., Cancilla, J., Matute, G. and Díaz Rodríguez, P. (2013) Neural Network Models to Classify Olive Oils within the Protected Denomination of Origin Framework. *International Journal of Food Science and Technology*, **48**, 2528-2534. http://dx.doi.org/10.1111/ijfs.12245

[73] Marini, F., Magrí, A.L., Bucci, R. and Magrí, A.D. (2007) Use of Different Artificial Neural Networks to Resolve Binary Blends of Monocultivar Italian Olive Oils. *Analytica Chimica Acta*, **599**, 232-240. http://dx.doi.org/10.1016/j.aca.2007.08.006

[74] Zupan, J., Novic, M., Li, X. and Gasteiger, J. (1994) Classification of Multicomponent Analytical Data of Olive Oils Using Different Neural Networks. *Analytica Chimica Acta*, **292**, 219-234. http://dx.doi.org/10.1016/0003-2670(94)00085-9

[75] Furferi, R., Carfagni, M. and Daou, M. (2007) Artificial Neural Network Software for Real Time Estimation of Olive Oil Qualitative Parameters during Continuous Extraction. *Computers and Electronics in Agriculture*, **55**, 115-131. http://dx.doi.org/10.1016/j.compag.2006.12.006

[76] Furferi, R., Carfagni, M. and Daou, M. (2008) Real-Time Estimation of Peroxides and Acidity Level of Extra-Virgin Olive Oil: An Integrated Approach. *International Journal of Mathematics and Computers in Simulation*, **2**, 206-214.

[77] Torrecilla, J.S., Mena, M.L., Yáñez-Sedeño, P. and García, J. (2007) Application of Artificial Neural Network to the Determination of Phenolic Compounds in Olive Oil Mill Wastewater. *Journal of Food Engineering*, **81**, 544-552. http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2006.12.003

[78] Torrecilla, J.S., Mena, M.L., Yáñez-Sedeño, P. and García, J. (2008) Field Determination of Phenolic Compounds in Olive Oil Mill Wastewater by Artificial Neural Network. *Biochemical Engineering Journal*, **38**, 171-179. http://dx.doi.org/10.1016/j.bej.2007.06.013

[79] Bordons, C. and Cueli, J. (2004) Predictive Controller with Estimation of Measurable Disturbances. Application to an Olive Oil Mill. *Journal of Process Control*, **14**, 305-315. http://dx.doi.org/10.1016/S0959-1524(03)00043-X

[80] Jiménez, A., Beltrán, G., Aguilera, M.P. and Uceda, M. (2008) A Sensor-Software Based on Artificial Neural Network for the Optimization of the Olive Oil Elaboration Process. *Sensors and Actuators B: Chemical*, **129**, 985-990. http://dx.doi.org/10.1016/j.snb.2007.09.030

Abbreviations

MLP: Multilayer Perceptron; BP: Backpropagation; MLPFF: Multilayer Feedforward; RBF: Radian Backpropagation; SOM: Self-Organizing-Map; RNN: Radian neural network; P: Perceptron.

Y. Allouche et al., J. Near Infrared Spectrosc. 23, 111–121 (2015)
Received: 17 March 2015 ■ Revised: 19 May 2015 ■ Accep

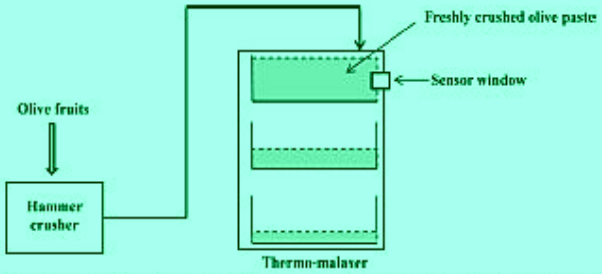
ment

duced to the useful range between . Then, a principal-component anal- remove anomalous spectra using the Inscrambler 9.7, Camo, Oslo, Norway]. mained were then pretreated by two s. The first was the moving average ambler 9.7,] and the second was the et transform at level 4 [using Matlab e Math Works, Natick, MA],[9] and then

grid, Listello and double grid crusher, and the values 4, 5, 6 and 7 for the sieve diameters.

In this study, the target outputs were individually treated, and so 11 neural networks were built for each preprocessing procedure. Four of these networks corresponded to the prediction of olive fruit characteristics (pulp/stone ratio, olive fruit moisture, oil content and EI) and the rest to the prediction of oil characteristics (free acidity, peroxide index, K_{232} and K_{270}, polyphenol content, chlorophyll and carotenoid contents).

For the acceptance of ANN models in the validation step, the criterion of the minimum root mean square error of prediction



gram of localisation of the sensor AOTF-NIR in the first body of the thermo-malaxer in the olive oil mill.

Spectral pretrea

First, spectra were 1100 nm and 2150 nm ysis was performed t Hotelling-T^2 function Spectral data that re smoothing procedure (factor 6) [using Unsc "Daubechies D4" wave 7.10.0.499 (R2010a); T

Figure 1. Schematic d

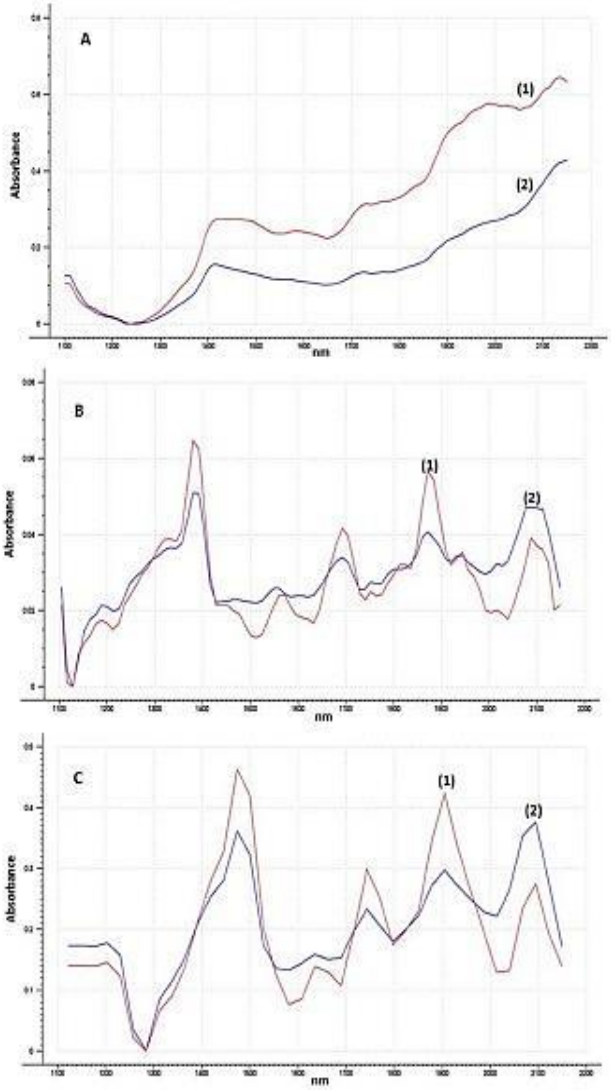


Figure 2. AOTF-NIR spectra of freshly crushed olive paste in the first body of the malaxer with (1) high moisture (59.06%) and (2) low moisture content (45.07%). (A) Raw spectra. (B) Moving average and first-derivative spectra. (C) Wavelet transform and first-derivative spectra.

(*RMSEP*) and maximum coefficient of determination of validation (r^2) between real values and predicted values was used:

$$RMSEP = \sqrt{\sum \frac{(y_{SS\text{-}ANN} - y_r)^2}{n-1}}$$

where $y_{SS\text{-}ANN}$ is the predicted value; y_r is the real value; and n is the number of samples in the data set.

Additionally, the parameter *RPD* (residual predictive deviation) was calculated as an indicator of models quality. *RPD* represents the ratio between the *RMSEP* and the standard

Table 1. Ranges of input variables used for ANN construction.

Input variables	
Olive fruit temperature (°C)	2.5–19.4
Room temperature (°C)	4.3–20.7
Hammer velocity (rpm) Sieve diameter (mm)	2000–3000 4–5–6–7
Type of hammer crusher	Single grid–double grid–Listello

$n = 210$.

Table 2. Mean values and ranges of olive fruit parameters obtained by reference laboratory methods.

Olive fruit parameters	Mean ± *SD*	Minimum–maximum
Extractability index (%)[a]	0.67 ± 0.09	0.35–1.01
Oil content on FW (%)[b]	22.46 ± 2.76	15.26–30.87
Olive fruit moisture (%)[b]	51.19 ± 5.13	41.14–64.14
Pulp/stone ratio[c]	4.29 ± 1.35	1.78–6.52

[a]$n = 210$; [b]$n = 630$; [c]$n = 267$.
FW: fresh weight. *SD*: standard deviation.

deviation (*SD*) of the reference data. *RPD* values greater than 3 indicate that calibration is suitable for quality-control purposes.[17]

Results and discussion

In this paper, ANNs were built to predict the characteristics of olive fruit to be processed (moisture, oil content, pulp/stone ratio and extractability) and the extracted olive oil (quality indices, polyphenols and pigments). The descriptive statistics obtained for these parameters by reference analysis showed great variability, certainly owing to the changing nature of the fruit throughout the four olive campaigns. In Tables 2 and 3, the mean value and range of each parameter are specified.

ANN models for olive fruit characteristics

The optimal ANN topologies found for the characteristics of olive fruit are detailed in Table 4. As shown in the table, for both preprocessing spectral data procedures (moving average and wavelet transform), "trainrp," based on updating weight and bias values according to the back resilient algorithm, performs the best training function for all studied parameters with R^2 training values higher than 0.995.

Two hidden layers with different but a similar number of total neurons and a sigmoid transference function between different layers ("tansig" and/or "logsig") were observed in general for almost studied parameters and for both pretreatment procedures, except for moisture and EI where three hidden layers with the highest number of neurons were needed for ANN construction using moving average preprocessing. Moreover, it is worth noting that the sigmoid "tansig" function was applied for the output layer in all cases but one. The exception was found in the case of the ANN using the pretreated moving average for oil content where the lineal "purelin" function was used.

The predictive ability of each generated model was validated using data from a series of samples that were excluded from the training step. As shown in Table 4, more accurate results, with higher coefficients of determination (r^2) and *RPD* values, and a lower error of prediction (*RMSEP*) were achieved using the wavelet pretreatment when compared with those of the moving average for all studied olive fruit parameters. Moreover, the models obtained for olive moisture and pulp/stone showed a very good prediction, since *RPD* values were higher than 3.5.[17] In the case of EI and oil content, although the *RPD* values were lower than 3, the results can be considered to be reasonable and possibly suitable for screening or monitoring, since the ratio error range values were higher than 12, the minimum recommended for quality control[17] (16.50 and 14.06, respectively, for EI and oil content).

In Figure 3, the results of SS-ANN prediction using wavelet preprocessing are shown; note that the slopes are close to 1 in all cases.

To the authors' best knowledge to date, there is a paucity of studies dealing with online prediction of olive fruit characteristics under dynamic conditions in the literature. Therefore, the results found here may only be compared with those reported by other authors using laboratory offline NIR instruments. Nonetheless, direct comparisons are not relevant, since the sampling errors are different in both types of analysis. This can be explained by the fact that larger batches of olive paste

Table 3. Mean values and ranges of olive oil parameters obtained by reference laboratory methods.

Olive oil parameters	Mean ± *SD*	Minimum–maximum
Free acidity (% of oleic acid)	0.44 ± 0.44	0.12–2.92
Peroxide values (mEq O_2 kg^{-1})	4.24 ± 2.05	1.42–10.7
UV absorption at 232 nm (K_{232})	1.59 ± 0.16	1.3–2.18
UV absorption at 270 nm (K_{270})	0.15 ± 0.03	0.08–0.23
Carotenoid content (mg kg^{-1})	7.0 ± 2.2	3.0–14.9
Chlorophyll content (mg kg^{-1})	6.6 ± 3.4	1.5–21.0
Polyphenol content (mg kg^{-1})	488 ± 197	130–1228

$n = 210$.
SD: standard deviation.

Table 4. Optimal ANN topologies obtained for olive fruit characteristics.

Olive fruit parameters	Moving average						Wavelet transform					
	ANN topology		Training	Validation			ANN topology		Training	Validation		
	Neurons	Transfer f.	R^2	r^2	*RMSEP*	*RPD*	Neurons	Transfer f.	R^2	r^2	*RMSEP*	*RPD*
Extractability index (%)	66/78/84/1	tan/log/tan/tan	0.999	0.655	0.05	1.61	28/32/1	tan/tan/tan	0.998	0.807	0.04	2.23
Oil content on FW (%)	35/23/1	tan/log/prl	1.000	0.759	1.43	1.94	24/38/1	tan/log/tan	0.995	0.846	1.11	2.48
Olive moisture (%)	66/72/80/1	tan/log/log/tan	0.999	0.882	1.79	2.86	30/40/1	tan/tan/tan	0.998	0.922	1.46	3.51
Pulp/stone ratio	36/34/1	tan/log/tan	0.999	0.928	0.36	3.70	29/40/1	tan/log/tan	0.999	0.952	0.31	4.41

Training function was "trainrp" for all parameters.
Transfer f.: transfer function: tan: tansig; log: logsig; prl: purelin. R^2: coefficient of determination of training. r^2: coefficient of determination of validation. *RMSEP*: root mean square error of prediction. *RPD*: residual predictive deviation. FW: fresh weight.

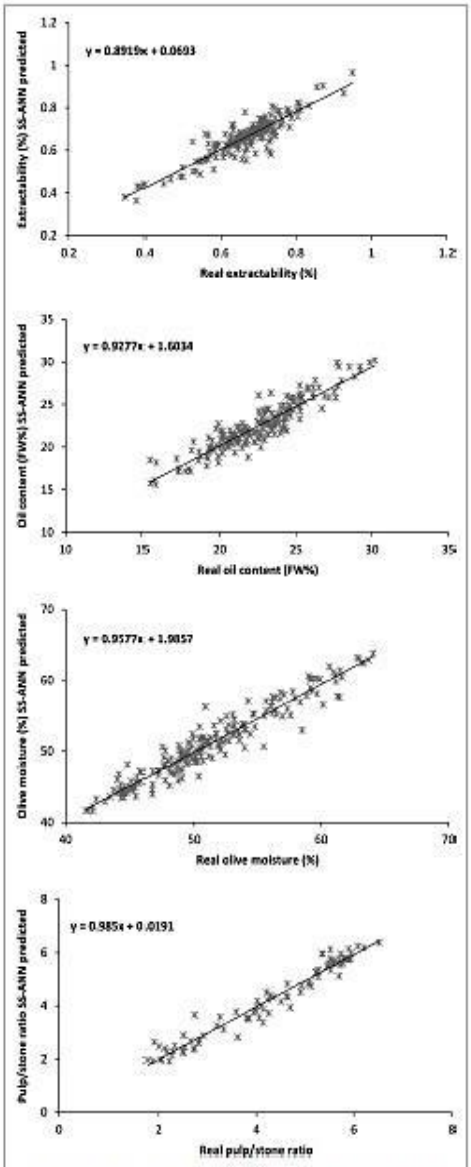


Figure 3. Scatter plot of real vs. SS-ANN predicted olive fruit characteristics using wavelet preprocessing.

(approximately 500 kg) are scanned to acquire the spectra online compared with the small amount of sample (less than 1 kg of olive paste) used in a static offline laboratory analysis. These samples cannot be representative of the true average of the whole batch, and consequently the sampling error will probably be much higher in these online dynamic measurements. On the other hand, and since no studies have hitherto been available regarding either offline or online analyses of pulp/stone ratio and EI, only olive moisture and oil content are discussed below.

The results for olive moisture obtained in this study are quite similar to those previously found by Bendini *et al.*[18] (r^2 = 0.912). However, Jiménez *et al.*[19] and García-Sánchez *et al.*[20] obtained higher r^2 values (0.988 and 0.960, respectively). Moreover, these authors reported lower values of *RMSEP*, 1.29% being the highest value obtained by Bendini *et al.*[18] For oil content, the same authors recorded a higher linear correlation with r^2 = 0.982,[20] r^2 = 0.970[20] and r^2 = 0.922,[18] and lower *RMSEP* values of 0.81%[19,21] and 0.67%.[18]

Furthermore, it is worth noting that online determination of these two parameters has been recently described by Salguero-Chaparro *et al.*,[22] but in intact olives. These authors reported lower r^2 values of 0.870 and 0.790, respectively, for moisture and oil content. Their *RPD* values were also lower than those obtained in this work, while the *RMSEP* values were quite high (*RPD* of 2.76 and 2.37, and *RMSEP* of 2.98% and 2.15%, respectively, for moisture and oil content).

Otherwise, on-tree in-the-field prediction of moisture and oil content in intact olive fruit has been reported by García and León[23]: r^2 = 0.689 and r^2 = 0.723, respectively.

ANN models for olive oil chemical-quality parameters and composition

The optimal ANN topologies found for olive oil chemical quality parameters and composition are listed in Table 5. As for olive fruit characteristics, the "trainrp" training function was observed to be the most suitable for all the studied parameters with R^2-training values higher than 0.999.

By using the wavelet pretreatment, two hidden layers with different numbers of neurons were obtained for all the studied parameters. This same topology was obtained for peroxides and polyphenols in the case of moving average preprocessing, while three hidden layers were observed for the rest of the parameters.

The sigmoid "tansig" function was applied for transference between hidden layers for the ANN wavelet pretreated for almost parameters with an exception for peroxides where both "tansig" and "logsig" were used. Otherwise, these transference functions were also found to be the most suitable for ANN moving average pretreatment except for polyphenols where only "tansig" was employed. Moreover, again, the sigmoid "tansig" function was applied for the output layer for all studied parameters and both preprocessing procedures.

As for olive fruit parameters, the validation of models showed more accurate results for wavelet pretreated data with a higher coefficient of determination r^2, greater *RPD* values (all above 3 and rated as suitable for quality control or process control)[17] and lower *RMSEP* values than those obtained using the moving average preprocessing (Table 5). Figure 4(A) and Figure 4(B) illustrate the relationship between

Table 5. Optimal ANN topologies obtained for olive oil characteristics.

Olive oil parameters	Moving average						Wavelet transform					
	ANN topology		Training	Validation			ANN topology		Training	Validation		
	Neurons	Transfer f.	R^2	r^2	*RMSEP*	*RPD*	Neurons	Transfer f.	R^2	r^2	*RMSEP*	*RPD*
Free acidity (% of oleic acid)	52/52/50/1	tan/log/log/tan	0.999	0.902	0.14	3.09	39/49/1	tan/tan/tan	0.999	0.948	0.11	4.07
Peroxide values (mEq O_2 kg^{-1})	42/38/1	tan/log/tan	0.999	0.879	0.73	2.82	38/38/1	tan/log/tan	0.999	0.955	0.45	4.54
UV absorption at 232 nm (K_{232})	40/54/46/1	tan/log/log/tan	0.999	0.875	0.06	2.80	30/43/1	tan/tan/tan	0.999	0.947	0.04	4.37
UV absorption at 270 nm (K_{270})	84/78/88/1	tan/log/tan/tan	1.000	0.785	0.01	2.14	20/40/1	tan/tan/tan	0.999	0.899	0.01	3.15
Carotenoid content (mg kg^{-1})	49/51/51/1	tan/log/tan/tan	0.999	0.852	0.85	2.54	23/26/1	tan/tan/tan	0.999	0.926	0.58	3.72
Chlorophyll content (mg kg^{-1})	35/34/47/1	tan/log/tan/tan	0.999	0.840	1.42	2.39	29/40/1	tan/tan/tan	0.999	0.917	0.96	3.54
Polyphenol content (mg kg^{-1})	35/39/1	tan/tan/tan	0.999	0.812	87.60	2.25	26/14/1	tan/tan/tan	0.999	0.904	61.50	3.21

Training function was "trainrp" for all parameters.
Transfer f.: transfer function: tan: tansig, log: logsig, prt: purelin. R^2: coefficient of determination of training, r^2: coefficient of determination of validation. *RMSEP*: root mean square error of prediction, *RPD*: residual predictive deviation.

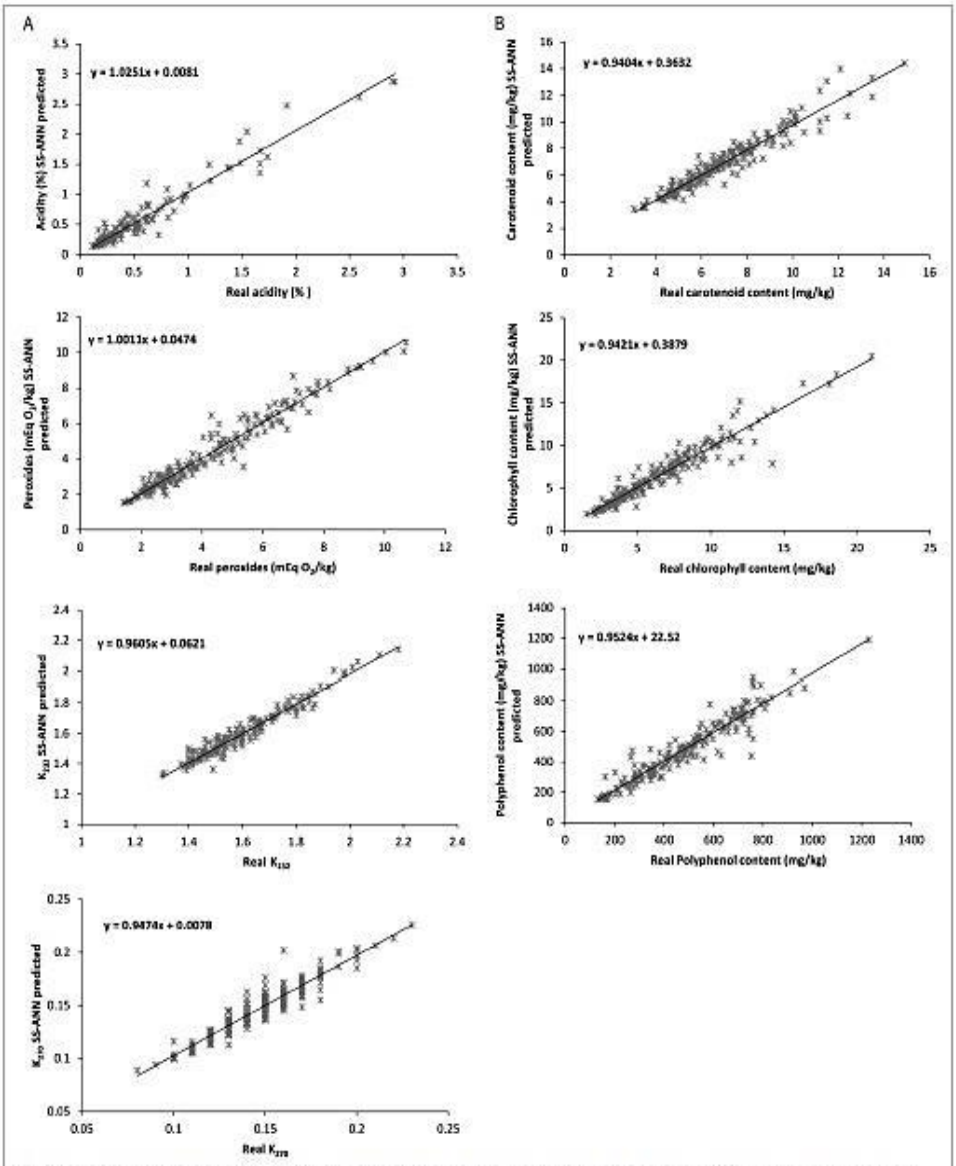


Figure 4. (A) Scatter plot of real vs. SS-ANN predicted olive oil quality indices using wavelet preprocessing. (B) Scatter plot of real vs. SS-ANN predicted olive oil composition using wavelet preprocessing.

SS-ANN predicted and real values for all oil parameters using the wavelet technique.

As far as we know, there have been no studies to date dealing with online prediction of olive oil characteristics in olive paste under dynamic conditions. In the scientific literature, there is only one work describing the determination of free acidity in olive paste, but this used Raman spectrometry under laboratory conditions.[24] Moreover, prediction of olive

oil chemical-quality parameters and composition is mostly performed on filtered oil samples using offline NIR instruments,[18,25–29] and only a few papers have reported online olive oil characterisation.[7,8] On the other hand, some studies have described the prediction of oil-quality parameters in terms of free acidity in intact olive fruit by either offline[30,31] or online measurement.[22] Once again, these statements indicate that direct comparisons here are not relevant, and the only study with any similarity to ours is that previously reported by Muik *et al.*[24] In that paper, although measurements were performed using offline instruments, olive paste samples were in continuous movement (rotation) during spectrum acquisition in order to ensure sample homogeneity.

The coefficient of determination obtained in this work for free acidity is similar to that reported by Muik *et al.*[24] (r^2 = 0.955) in the range 0.15–3.79% oleic acid, whereas we obtained a lower *RMSEP* (0.28%). A higher *RMSEP* (2.53%) and much lower *RPD* (1.60) values were also obtained by Salguero-Chaparro *et al.*,[22] in the wide range of 0.09–26.06%. For peroxides, our results are closer to those described by Armenta *et al.*[25] and Mailer[29] in olive oil samples showing r^2 values of 0.978 and 0.920, respectively. *RMSEP* was lower than that obtained by Armenta *et al.*[25] (1.87 mEq O_2 kg^{-1}), whereas *RPD* was much higher than that recorded by Cayuela Sánchez *et al.*[28] (2.84).

For conjugated dienes (K_{232}), these latter authors also found a lower *RPD* value than that obtained in our study (2.56) (r^2 was not mentioned), indicating a satisfactory predictive model. Manley and Eberle[32] found reliable prediction results for K_{232} and K_{270} in olive oils with a different degree of oxidation (r^2 = 0.940, *RMSEP* = 0.94, and r^2 = 0.870, *RMSEP* = 0.09, respectively).

The results obtained for chlorophylls showed a lower r^2 than those obtained by Jiménez[7] (0.986), even though *RMSEP* was similar (0.96 mg kg^{-1}). This author also recorded a higher r^2 for carotenes (0.970) and an *RMSEP* of 0.66 mg kg^{-1}. Finally, the results found for polyphenols were closer to those obtained by Mailer,[29] showing an r^2 of 0.889.

Conclusion

From the results obtained in this study, it can be concluded that the combination of AOTF-NIR sensors for real-time monitoring of olive paste prior to the kneading step and artificial intelligence tools such as neural networks is feasible for online prediction of the characteristics of olive fruit to be processed.

The use of data-reduction techniques that maintain spectral information such as the wavelet, together with the process variables, allows neural models to be constructed with sufficient predictive capacity to enable optimisation process strategies to be set in terms of both productivity and oil quality, by providing (in advance) reference values to establish the working setpoints. These predictions are performed almost instantaneously, which makes this methodology indispensable for any process-automation system where the aim is to regulate different variables with minimal loss of time and costs.

Acknowledgements

This work was supported by the Project P10-AGR 6429 "Modelado y optimización del proceso de elaboración del aceite de oliva virgen. Proyecto I," funded by The Ministry of Economy, Innovation and Science from "Junta de Andalucía" and the Ministry of Science and Innovation.

References

1. S. Predieri, C. Medoro, M. Magli, E. Gatti and A. Rotondi, "Virgin olive oil sensory properties: Comparing trained panel evaluation and consumer preferences," *Food Res. Int.* **54**, 2091 (2013). doi: http://dx.doi.org/10.1016/j.foodres.2013.08.014
2. E. Waterman and B. Lockwood, "Active components and clinical applications of olive oil," *Altern. Med. Rev.* **12**, 331 (2007).
3. M. Uceda, A. Jiménez and G. Beltrán, "Olive oil extraction and quality," *Grasas Aceites* **57**, 25 (2006). doi: http://dx.doi.org/10.3989/gya.2006.v57.i1.19
4. M. Hermoso, A. García-Ortíz, A. Jiménez, M. Uceda and J. Morales, "Automatización de almazaras. Controles experimentales para la caracterización y regulación del proceso de elaboración," INIA (CAO97-015).1997–2000.
5. S. Armenta, J. Moros, S. Garrigues and M. De La Guardia, "The use of near-infrared spectrometry in the olive oil industry," *Crit. Rev. Food Sci. Nutr.* **50**, 567 (2010). doi: http://dx.doi.org/10.1080/10408390802606790
6. M. Hermoso, M. Uceda, A. García, A. Jiménez and G. Beltrán, "Preliminary results of NIR on-line for oil content and humidity in olive cakes from the two-phases decanter," *Acta Hortic.* **474**, 717 (1997).
7. A. Jiménez, "Monitoring carotenoid and chlorophyll pigments in virgin olive oil by visible-near infrared transmittance spectroscopy. On-line application," *J. Near Infrared Spectrosc.* **11**, 219 (2003). doi: http://dx.doi.org/10.1255/jnirs.368
8. A. Jiménez, A. Molina and M.I. Pascual, "Using optical NIR for on-line virgin olive oils characterization," *Sens. Actuator B-Chem.* **107**, 44 (2005). doi: http://dx.doi.org/10.1016/j.snb.2004.11.103
9. A. Jiménez, G. Beltrán, M.P. Aguilera and M. Uceda, "A sensor-software based on artificial neural network for the optimization of olive oil elaboration process," *Sens. Actuator B-Chem.* **129**, 985 (2008). doi: http://dx.doi.org/10.1016/j.snb.2007.09.030
10. P. Lash, "Spectral pre-processing for biomedical vibrational spectroscopy and microspectroscopic imaging," *Chemometrics Intell. Lab. Syst.* **117**, 100 (2012). doi: http://dx.doi.org/10.1016/j.chemolab.2012.03.011

11. Y. Allouche, M. Uceda, A. Jiménez, M.P. Aguilera, J.J. Gaforio and G. Beltrán, "Fruit quality and olive leaf and Stone addition affects Picual virgin olive oil triterpenic content," *J. Agric. Food Chem.* **57**, 8998 (2009). doi: http://dx.doi.org/10.1021/jf902105h

12. G. Beltrán, M. Uceda, A. Jiménez and M.P. Aguilera, "Olive oil extractability index as a parameter for olive cultivar characterization," *J. Sci. Food Agric.* **83**, 503 (2003). doi: http://dx.doi.org/10.1002/jsfa.1369

13. AENOR, Asociación Española de Normalización y Certificación. *Materias Grasas. Humedad y materias volátiles (método de la estufa de aire). Norma UNE 55-020-73*, Madrid (1973).

14. "Commission Implementing Regulation (EU) No. 1348/2013 amending Regulation (EEC) No 2568/91 on the characteristics of olive oil and olive-residue oil and on the relevant methods of analysis," *Off. J. Eur. Union* **L338**, 31 (2014).

15. A. Vázquez-Roncero, C. Janer del Valle and M.L. Janer del Valle, "Determinación de polifenoles totales del aceite de oliva," *Grasas Aceites* **24**, 350 (1973).

16. M.I. Mínguez-Mosquera, L. Rejano-Navarro, B. Gandul-Rojas, A.H. Sánchez-Gómez and J. Garrido-Fernández, "Colour-pigment correlation in virgin olive oil," *J. Am. Oil Chem. Soc.* **68**, 332 (1991). doi: http://dx.doi.org/10.1007/BF02657688

17. P. Williams *Near-Infrared Technology—Getting the Best Out of Light. a Short Course in the Practical Implementation of Near-Infrared Spectroscopy for the User.* Edn. 5.3 March 2008. PDK Projects, Nanaimo, Canada (2008).

18. A. Bendini, L. Cerratini, F. Di Virgilio, P. Belloni, G. Lercker and T. Gallina Toschi, "In-process monitoring in industrial olive mill by means of FT-NIR," *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **109**, 498 (2007). doi: http://dx.doi.org/10.1002/ejlt.200700001

19. A. Jiménez, E. Izquierdo, F. Rodríguez, J.I. Dueñas and C. Tortosa, "Determinación de grasa y humedad en aceitunas mediante medidas de reflectancia en infrarrojo cercano," *Grasas Aceites* **51**, 311 (2000).

20. A. García-Sánchez, N. Ramos Martos and E. Ballesteros, "Estudio comparativo de distintas técnicas analíticas (espectroscopía de NIR y RMN y extracción mediante Soxhlet) para la determinación del contenido graso y de humedad en aceitunas y orujo de Jaén," *Grasas Aceites* **56**, 220 (2005).

21. Muik, B. Lendl, A. Molina-Díaz and M.J. Ayora-Cañada, "Fourier transform Raman spectrometry for the quantitative analysis of oil content and humidity in olives," *Appl. Spectrosc.* **57**, 233 (2003). doi: http://dx.doi.org/10.1366/00037020332153516 9

22. L. Salguero-Chaparro, V. Beaten, J.A. Fernández-Pierna and F. Peña-Rodríguez, "Near infrared spectroscopy (NIRS) for on-line determination of quality parameters in intact olives," *Food Chem.* **139**, 1121 (2013). doi: http://dx.doi.org/10.1016/j.foodchem.2013.01.002

23. A. Garcia and L. Léon, "Non-destructive assessment of olive fruit ripening by portable near infrared spectroscopy," *Grasas Aceites* **62**, 268 (2011). doi: http://dx.doi.org/10.3989/gya.089610

24. B. Muik, B. Lendl, A. Molina-Díaz and M.J. Ayora-Cañada, "Direct, reagent-free determination of free fatty acid content in olive oil and olives by Fourier transform Raman spectrometry," *Anal. Chim. Acta* **487**, 211 (2003). doi: http://dx.doi.org/10.1016/S0003-2670(03)00560-9

25. S. Armenta, S. Garrigues and M. de la Guardia, "Determination of edible oil parameters by near infrared spectrometry," *Anal. Chim. Acta* **596**, 330 (2007). doi: http://dx.doi.org/10.1016/j.aca.2007.06.028

26. A. Bendini, L. Cerratini, F. Di Virgilio, P. Belloni, M. Bonoli-Carbognin and G. Lercker, "Preliminary evaluation of the application of the FTIR spectroscopy to control the geographic origin and quality of virgin olive oils," *J. Food Qual.* **30**, 424 (2007). doi: http://dx.doi.org/10.1111/j.1745-4557.2007.00132.x

27. R.M. El-Abassy, P. Donfack and A. Materny, "Rapid determination of free fatty acid in extra virgin olive oil by Raman spectroscopy and multivariate analysis," *J. Am. Oil Chem. Soc.* **86**, 507 (2009). doi: http://dx.doi.org/10.1007/s11746-009-1389-0

28. J.A. Cayuela Sánchez, W. Moreda and J.M. García, "Rapid determination of olive oil oxidative stability and its major quality parameters using Vis/NIR transmittance spectroscopy," *J. Agric. Food Chem.* **61**, 8056 (2013). doi: http://dx.doi.org/10.1021/jf4021575

29. R.J. Mailer, "Rapid evaluation of olive oil quality by NIR reflectance spectroscopy," *J. Am. Oil Chem. Soc.* **81**, 823 (2004). doi: http://dx.doi.org/10.1007/s11746-004-0986-4

30. J.A. Cayuela, J.M. García and N. Caliani, "NIR prediction of fruit moisture, free acidity and oil content in intact olives," *Grasas Aceites* **60**, 194 (2009). doi: http://dx.doi.org/10.3989/gya.097308

31. J.A. Cayuela and M.C. Pérez-Camino, "Prediction of quality of intact olives by near infrared spectroscopy," *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **112**, 1209 (2010). doi: http://dx.doi.org/10.1002/ejlt.201000372

32. M. Manley and K. Eberle, "Comparison of Fourier transform near infrared spectroscopy partial least square regression models for South African extra virgin olive oil using spectra collected on two spectrophotometers at different resolutions and path lengths," *J. Near Infrared Spectrosc.* **14**, 111 (2006). doi: http://dx.doi.org/10.1255/jnirs.597

Journal of Near Infrared Spectroscopy

A predictive artificial neural network model as a simulator of the extra virgin olive oil elaboration process

Journal:	*Journal of Near Infrared Spectroscopy*
Manuscript ID	Draft
Manuscript Type:	Original Research Article
Date Submitted by the Author:	n/a
Complete List of Authors:	Funes, Estrella; Instituto Andaluz de Investigacion y Formacion Agraria Pesquera Alimentaria y de la Produccion Ecologica, Centro 'Venta del Llano' Allouche, Yosra; Instituto Andaluz de Investigacion y Formacion Agraria Pesquera Alimentaria y de la Produccion Ecologica, Centro 'Venta del Llano' Beltrán, Gabriel; Instituto Andaluz de Investigacion y Formacion Agraria Pesquera Alimentaria y de la Produccion Ecologica, Centro 'Venta del Llano' Aguilera, M. Paz; Citoliva Foundation, Technological Scientific Park Geolit Jiménez, Antonio; Instituto Andaluz de Investigacion y Formacion Agraria Pesquera Alimentaria y de la Produccion Ecologica, Centro 'Venta del Llano'
Keywords:	Artificial neural network, olive oil, olive pomace, extraction process, NIR
Abstract:	Data of process variables and spectral signals in the near infrared region (NIR) of raw material have permitted, by using artificial neural networks (ANN), the design of models for the predictive characterization of products and by-products from the virgin olive oil elaboration process. In this work, the results obtained are shown through a system constituted by nine neural networks which permitted real-time work collecting information on physical sensors such as temperature, flows, current intensity, etc., and physicochemical ones like the NIR spectrum of the olive mass, to predict the characteristics of the virgin olive oil as a quality objective. The system proposed permits its management both as a "simulator" to previously adjust the process variables in accordance with the objectives defined for its productivity or quality, and its integration into a control system of the function of a "virtual plant" permitting that system to adjust, in real time, the variables suited to achieving the objectives.

SCHOLARONE™
Manuscripts

https://mc.manuscriptcentral.com/jnirs

Researcher paper

A predictive artificial neural network model as a simulator of the extra virgin olive oil elaboration process

Estrella Funes[1], Yosra Allouche[1], Gabriel Beltrán[1], M. Paz Aguliera[2] and Antonio Jiménez[1]

[1]IFAPA- Centro 'Venta del Llano', Junta de Andalucía, PO Box50, Mengibar, Jaén, E-23620, Spain.

[2] Citoliva Foundation, Technological Scientific Park Geolit. C/Sierra Morena, Planta Baja. Edif. CTSA, mod. 1 23620, Mengíbar, (Spain).

Corresponding author: Estrella Funes López IFAPA Centro 'Venta del Llano', Junta de Andalucía, PO Box50, Mengibar, Jaén, E-23620, Spain. Phone: 34 953 366366; **Fax:** 34 953 366380; **Email:** estrellafulo84@gmail.com

For Peer Review

Abstract

Data of process variables and spectral signals in the near infrared region (NIR) of raw material have permitted, by using artificial neural networks (ANN), the design of models for the predictive characterization of products and by-products from the virgin olive oil elaboration process.

In this work, the results obtained are shown through a system constituted by nine neural networks which permitted real-time work collecting information on physical sensors such as temperature, flows, current intensity, etc., and physicochemical ones like the NIR spectrum of the olive mass, to predict the characteristics of the virgin olive oil as a quality objective.

The system proposed permits its management both as a "simulator" to previously adjust the process variables in accordance with the objectives defined for its productivity or quality, and its integration into a control system of the function of a "virtual plant" permitting that system to adjust, in real time, the variables suited to achieving the objectives.

Keywords

Artificial neural network, olive oil, olive pomace, extraction process, NIR

For Peer Review

Abbreviations: **ANN,** artificial neural network; **AOTF-NIR,** Acousto-Optical Tunable Filters-Near Infrared; **EVOO,** extra virgin olive oil; **F_p,** Paste flow; **F_{oi},** Olive oil flow in vertical centrifuge; **Fw,** Water addition at HCD; **Fwi**, water flow in vertical; centrifuge **HCD,** Horizontal centrifuge decanter; **MTN,** micro talc natural; **R_1,** Oil overflow point; **L,** Past olive feed point; **RMSEP,** root mean of squared error of prediction; **RPD,** Residual Predictive Deviation; **RER,** Relative Error Range **Rv,** Rotational velocity; **Sd,** Sieve diameter; **t_m,** Malaxation time; **T_m,** Paste temperature; **T_o,** Olive fruits temperature; **T_{oi},** temperature of olive oil in vertical centrifuge; **T_{wi},** water temperature in vertical centrifuge; **VC**, Vertical centrifuge; **EVOO,** virgin olive oil.

Introduction

Olive oil manufacture as an economic activity is greatly increasing world-wide. To differentiate itself, the industry is opting to reduce production costs, increase extractability and/or increment the quality of oil. This situation is obliging the sector to meticulously control the whole process. The industrial manufacturing process of extra virgin olive oil (EVOO) shows a high degree of complexity due to the changeable nature of olives, requiring a constant regulation of their processing conditions. With the application of the SCADA system, this sector has advanced greatly in the management and automatic control of the process, although this is not yet complete. For an efficient control of the process, a tool is needed which permits advance information on the

For Peer Review

behaviour of the oil paste throughout the extraction process, in such a way that its different variables can be adapted to the characteristics of the raw material in terms of the objectives expected.

In this sense, artificial neural networks (ANN), applied with the support of measurements based on near infrared systems (NIR), could constitute a viable tool. NIR systems, due to their being non-destructive, multiparametric, rapid and reliable analysis techniques, are frequently used in different studies with intact olives[1-3] and for olive oil analysis[4]. The incorporation of more up-to-date NIR technologies (Diodo Array, AOTF) based on optical devices permit instantaneous and continuous scanning of oil mass, pomace or olive oil, adapted to the production process.

Artificial neural networks are being established in diverse sectors due to their classification and prediction capacity. ANNs are non-linear techniques which function as biological neurons under precise training. They have been applied for: the classification of EVOOs in terms of their origin [5]; to prevent adulterations with other types of vegetable oils[6,7]; to determine the load of polyphenols in olive mill water [8,9]; or to predict the quality parameters of the EVOOs [10-13]. Already at a process level studies have been made[14,15] for the application of the ANNs to predict 'on-line' the fat losses in the pomace starting from the spectra of the oils as they exit the horizontal decanter centrifuge, and certain technological variables in the process. More recently, both techniques were combined (ANNs and AOTF-NIR) to predict 'on-line' the extractability and potential characteristics of the fruit by means of the olive mass[16].

For Peer Review

This work aimed to design neural models predicting the characteristics of the pomace and of the EVOO based on ANNs from spectra of the olive paste provided by AOTF-NIR, taking into account the process conditions. By taking the predictions supplied, one can act on the different variables intervening in it under the objectives imposed to obtain an EVOO of extreme quality with a minimum of fat loss in the pomaces, thus optimizing the overall oil making process.

Materials and methods

Samples and reference methods

'Picual' variety olives collected in the IFAPA experimental farm in Mengibar (Jaén) were used. They were immediately ground in the IFAPA Centro Venta de Llano experimental plant. That plant is composed of a 2-phase extraction line (Pieralisi, Spain) [14,16,17] of 45 tons/day and formed by a hammer mill, a three-body beater (600 kg), a 2-phase horizontal decanter centrifuge and a vertical centrifuge to clarify the oil. The whole process was controlled by the automation software Procioleo (Procisa, Spain).

The assays, modifying the different process variables, were carried out between the months of November and February during five consecutive agricultural seasons, in which the NIR spectral data collection of olive paste was performed, as well as the corresponding physical samples of pomace and EVOO for their subsequent analysis. All the samples in one same assay were collected in triplicate.

For Peer Review

The pomace samples taken at the outlet of the horizontal decanter centrifuge were analysed for their moisture (MP) and fat content (FC) by drying them in forced air of 105ºC[18]and analysis in a nuclear magnetic resonance machine (NMR Bruker, Spain), respectively. All the results were expressed in %. The fat content was determined on dry matter by (FDM)

$$FDM(\%) = \left(\frac{FC}{100 - MP}\right) * 100$$

The EVOO samples collected at the outlet of the vertical centrifuge were filtered and stored at -15º up to their analysis. The determinations: free acidity (% of oleic acid), the peroxide index PV ($meqO_2/kg$) and the coefficients K_{232}, K_{270} of UV absorption were found following the analysis method described by the European Union 1348/2013[19]. The carotene and chlorophyll contents (mg/Kg) were determined by absorbance measurements at 470nm and 670nm, respectively, by the method of Minguez-Mosquera *et al.* [20].

The content of total phenols present in the olive oil (mg/Kg of caffeic acid) was determined through their extraction with methanol:water starting from a solution of oil in hexane, and their concentration was found by colorimetry measured at 725nm using Folin-Ciocalteau reagent in accordance with Vázquez Rocero et. al.[21]. The total content of tocopherols in mg/kg was resolved following the norm ISO 9936:2016[22] by HPLC and detection at 292nm.

For Peer Review

Analysis and spectral treatment

In this study, Acousto-Optical Tunable Filters-Near Infrared (AOTF-NIR) Luminar 5030 (Brimrose Corp. USA) equipment connected by optical fibre to a reflectance terminal placed half-way in the first body of the beater in accordance with what was described in other works [16] was used. For each assay, the olive paste was scanned in triplicate. The spectra were taken under a ratio of 10 scans/s, in the range of 1100-2500nm and at a resolution of 2 nm. These spectra were subjected to two treatment groups; the first one to eliminate the outliers by visual analysis and PCA screening using the function Hotelling-T^2 in the 'The Unscrambler' (Unscrambler 7.5, Camo Inc.) software, and a second treatment group consisting of a reduction in the range at 1100-2150nm, a filtrate of the signals through the function Wavelet 'Daubechies' (db4), at level 4, and a correction of the baseline by means of the 1st derivative 'Savitzky-Golay (SG) with three smoothing points, in order to reduce noise, to correct the baseline and to convert the initial scanning into a spectrum of only 39 points.

Artificial neural networks

The artificial neural networks used were the 'feed-forward back-propagation' type of supervised learning based on an algorithm of descending gradients. The ANNs were designed in the Matlab software programme (Version 7.10.0.499, R2010a).

The neurons in the network connected by weights are in charge of making predictions with the least error, so that the values of the weights have to be optimized by

For Peer Review

feedback. The number of neurons per layer (1-90), the transfer function between layers ('tansig', 'logsig', 'purelin'), the training algorithms ('trainrp', 'trainlm') and the number of iterations (50-1000) were tested to seek the option offering a prediction with a high level of correlation (r) between the real data and those estimated, with the least error (RMSEP) in the shortest time possible.

To test the precision of the networks, two parameters were calculated: RPD (Residual Predictive Deviation) and RER (Relative Error Range). RPD values (ratio between the SD and RMSEP) of over 3 indicate that the network is capable of supplying reliable results [23,24]. Values of over 10 for the parameter RER (ratio between the validation range and RMSEP) indicate that calibration can be employed in quality control [23,24].

In order to evaluate the robustness of the prediction of the neural models developed, a means comparison t-Test was applied between paired samples for 95% confidence on data from assays made in another season, which was not employed in the formal setting up of ANNs.

Results and discussion

Data for ANN building

For the design and building of ANNs based on model supervision it is necessarily obligatory to use real experimental data, which permit them to learn and predict in

For Peer Review

reasonable agreement with the 'education' received. For the case of this study, the monitoring carried out of the EVOO elaboration process throughout different olive oil seasons has permitted the inclusion in a database of a large amount of information about its behaviour in the different situations inferred. This process is seen to be submitted to a considerable degree of perturbations, basically triggered by the characteristics of the fruit to be processed and by the objectives they are supposed to fulfil. These perturbations are embodied by the different variables that have to be handled in the process in accordance with extractability criteria or the characteristics of the oil extracted. For this purpose, a large database is necessary, which includes the widest variability possible of all and every one of the operative variables. In this way, the ANNs can learn with efficacy and supply reliable predictive models. Table 1 shows the different variables of the EVOO considered, which have been organized in accordance with the phase of the process in which they intervene, as well as the minimum-maximum ranges in which the work was done throughout the 693 assays performed, the latter being the most habitual ones in the optimization of the process.

The adjustment of these process variables is necessary due to the fruit not always presenting constant characteristics but, according to its maturation state, variety, or the corresponding agricultural season, it displays important changes in its phenological and compositional characteristics. These affect the extraction capacity of the process and the characteristics of the oil obtained. For that reason, a previous knowledge of the fruit's characteristics is indispensable and should be considered in the development

For Peer Review

of ANN predictive models. In this work, and for that characterization, it has been opted to employ NIR technology, whose applicability has already been demonstrated, and its integration into the processing line permits one to obtain all the real-time information needed. Figure 1 shows an abbreviated diagram of the EVOO process, with its principal phases and the location of the monitoring point of the fruit in it when ground.

The process variables and NIR spectrum signals therefore constitute the input data of the network, but the latter needs the objectives to be fulfilled so that it can be modelled. Table 2 details the two main objectives of the process considered and the information necessary in each one, which will form the output of the ANNs. For the industrial output of the process extractability is used. This is measured by the loss of oil in the by-product pomace, for which two related parameters need to be known: the fat content and the product's moisture. Several analysis parameters related to its quality and nutritional characteristics were selected in order to characterize the oil. Table 2 shows these parameters and the ranges of values employed both for the ANN training phase and for its validation. In that table its great variability obtained throughout the different years can be seen. The normal values of each of the parameters considered were widely covered in addition to the not very habitual extreme ones, but which do enhance the ANN learning phase.

For Peer Review

ANNs for the extractability in the EVOO process

As mentioned in the previous section, the process's yield, or its extraction capacity, has been associated in this work with the amount of oil with which the by-product, pomace, is obtained. The latter exits the process at the end of the second phase, when the solid-liquid phase separation (Figure 1) is carried out, so that the variables to be taken into account to form the vector of the input to the network, together with the NIR spectrum information of the mass entering the process, were those characterizing the conditioning process of the paste and the centrifuge extraction, as specified in Table 1. The network output vector has been associated with a single parameter, so that two ANNs were modelled, each with a different output: for the fat content in the moisture and for the content in moisture (Table.2). The predictions of both networks permit the calculation of the loss of fat in the pomace, in dry matter, which is the usual way that this industry visualizes the extractability of the process.

Table 3 shows the characteristics of the two best neural models obtained for this objective. The training of the networks, with 465 data, allowed the definition of two ANNs with three layers: the input layer, a hidden one, and the output layer, the moisture content parameter being the one requiring most neurons in the first two layers.

Of all the transfer functions between the layers tested, the one generally giving the best results was the sigmoid type function (Tsg), a very common one in works done in

For Peer Review

this field due to the way it evolves. However, for the case of fat content, the network output was slightly improved by employing a linear transfer function (Pln). In both cases, the most suitable learning function was "Trainrp", with which only 185 iterations were necessary to obtain the best predictive results during the validation of the networks with the 231 remaining results. The correlation found between the predicted values and the real data of the reference methods was highly significant ($r \geq 0{,}90$) and with similar prediction errors (RMSEP) to those found by means of other analysis techniques which measure the by-product directly.

In the study on the fat content and moisture in the pomace in two phases by NIR at-line systems, correlations of 0.97 and 0.88 for fat content and moisture, respectively, were found as well as errors of 0.24% and 1.19%, respectively [25]. In another work comparing NIR and Raman techniques, high correlations (0.92 and 0.95) with low RMSEP (0.21%, 2.1%) were found in their analyses of fat and moisture in pomaces for the case of NIR[26]. Smaller errors in the order of 0.11% for the fat content and 0.60% for moisture content in pomaces were obtained in the comparative study of different analysis techniques[27]. The combination of artificial neural networks and NIR systems used by Jiménez *et al.* [15] to predict the characteristics of the pomace on-line gave excellent correlations in the order of 0.9804 and 0.9796 for fat content and moisture, respectively, with errors of 0.20 and 0.55%[15].

By using the assay data not implicated in the modelling and building process of the neural networks, the robustness of the latter were verified on applying the t_e-Student

For Peer Review

test. Table 4 gives the processing conditions in different assays, along with the values predicted by the ANNs, the real laboratory values and the percentage of error between them. It can be seen that the predictions are similar to the real values, with an error percentage of below 10%, with no significant differences, at the 5% level, between the mean values obtained, which confirms the robustness of the models developed.

Table 4 depicts the results of the test applied in comparing predictions obtained by the models with the application of different real conditions in the process. The data employed (99) for performing that test were different from those used in the design and building of the models. With the different assays, similar values between the real and predicted values were noted, with an error percentage generally of fewer than 10%. A t_e-Student test shows, for each of the parameters, that there were no significant differences, at the 5% level, between the mean values obtained (actual v. predicted), which confirms the robustness of the ANNs developed.

ANN for the EVOO characteristics

With respect to the objective of the predictive characterization of the oil at the end of the elaboration process, the neural model design contemplates all the stages of that process, so that the input vector to the network has been enlarged with the characteristic variables of the clarification phase (Table 1). Together with these variables within the input vector, the NIR spectral data of the olive paste are included.

For Peer Review

As for the previous case, the output vector has been associated with a single parameter characteristic of the oil, whose value ranges can be seen in Table 2, which has meant the building of 7 neural models, permitting predictions to be made on the regulated quality characteristics, as well nutritional traits derived from the bioactive compounds considered.

In designing the neural models, the protocol used in the design of the models created for the extractability of the process was followed. The data employed for their training and validation were fewer, 591 in all, due to the elimination of outliers. For the training, 394 data were used to define the networks. The same as in the previous case, the network was composed of three layers. The number of neurons per layer was different in each case as can be seen in Table 3, with the smallest number in the hidden layer for the polyphenol network which had, in turn, one of the largest numbers of neurons in the input layer, the same as the chlorophylls.

All the networks coincided in the way they transferred the weights between the layers, doing so "logarithmically" (Lsg) for the input and hidden layers, although for the output layer, the 'sigmoid' function (Tsg) was selected. The training function employed was "Trainrp" for being the fastest. The best results were obtained at different iterations in each case, ranging from 50 for peroxides and up to 250 for the acidity network.

The predictive models developed gave good correlations with r values of 0.72-0.98, the UV absorption coefficients being the lowest. The remaining parameters were all above

For Peer Review

0.94 with small prediction errors. The quality indicator RER, with values above the optimal 10[23,24], confirms the good predictive capacity of the networks, although for the parameter RPD only the neural models of the parameters acidity, total polyphenols and chlorophyll pigments were higher than the optimal value of 3.

Other works have proved the versatility of the near infrared systems in the analysis on-line of olive oil for the building of PLS models to determine its acidity[28-30] and other parameters like pigments [29,30].

They supply good validation results with correlations of over R^2 to 0.89. Likewise, other studies performed to estimate in real time the acidity and peroxides of EVOO set up neural models with large prediction errors and mean errors of under 6% for acidity and 5% for peroxides [11-13].

Recently, in results obtained in studies prior to this work, it was possible to verify the robustness of the ANNs in predicting the potential characteristics of the EVOO from the spectral information on the ingoing fruit[16], although, for this purpose, the oil to be characterized was obtained by the Abencor system on a laboratory scale.

The same as in the models for the characterization of the pomace, the network predictions for EVOO were submitted to a t_e-Student test taking assay data not employed in the modelling in order to confirm the reliability and efficacy of the results estimated by the models. That test did not find any significant differences between the laboratory reference data and those estimated by the models, thus confirming their robustness. Tables 5a, b show some assays performed to which that test was applied.

For Peer Review

In the latter, the great variability in the data can be seen, with error percentages of under 15% in all the cases except for the UV absorption parameters, whose models gave minimal correlations.

Conclusions

Historical data of the process and NIR spectral characteristics of the product entering it have permitted the latter's modelling by using ANNs. These ANNs act as algorithms predicting the properties of the oils and by-products obtained, starting from the information on the characteristics of the fruit and on the conditions of the work established through the variables in the process.

The set of ANNs developed permits a global 'simulator' type tool to be defined in the EVOO process. This simulator is capable of making a predictive optimization of the process as from a NIR spectral database or by real-time scanning, adjusting those variables which enable the achievement of certain objectives such as reducing oil losses, obtaining oils with certain characteristics, etc.

For Peer Review

Acknowledgements

This work is supported by the project P10-AGR 6429 'Modelado and optimization of the process of elaboration of the virgin olive oil. Project I: Integration of sensors 'on-line' and techniques of neural networks for the optimization of the process', funded by

Government of Andalusia and the oil millers Juan Torres and Just Cárdenas for assistance.

The authors have declared no conflict of interest.

References

1. L. Salguero-Chaparro, V. Baeten, J.A. Fernández-Pierna and F. Peña-Rodríguez,"Near infrared spectroscopy (NIRS) for on-line determination of quality parameters in intact olives," *Food Chem.* **139**, (1-4), 1121–1126, (2013).

2. L. Salguero-Chaparro and F. Peña-Rodríguez," On-line versus off-line NIRS analysis of intact olives," *LWT - Food Sci. Technol.* **56** (2), 363–369 (2014).

3. E. Stella, R. Moscetti, R.P. Haff, D. Monarca, M. Cecchini, M. Contini and R. Massantini, "Review: Recent advances in the use of non-destructive near infrared spectroscopy for intact olive fruits," *J. Near Infrared Spectrosc.* **23**, 197–208 (2015).

4. M. Casale and R. Simonetti, "Review: Near infrared spectroscopy for analysing olive oils," *J. Near Infrared Spectrosc.* **22**, 59–80(2014).

5. J.S.Torrecilla, J.C. Cancilla, G. Matute, and P. Díaz-Rodríguez, "Neural network models to classify olive oils within the protected denomination of origin framework," *Int. J. Food Sci. Technol.* **48**, 2258–2534 (2013).

6. R. Aroca-Santos, J.C. Cancilla, G. Matute and J.S. Torrecilla, "Identifying and Quantifying Adulterants in Extra Virgin Olive Oil of the Picual Varietal by Absorption Spectroscopy and Nonlinear Modeling," *J. Agric. Food Chem.* **63** (23), 5646–5652 (2015).

7. J.S.Torrecilla, S. Vidal, R. Aroca-Santos, S.C.Wang and J.C. Cancilla, "Spectroscopic determination of the photodegradation of monovarietal extra virgin olive oils and their binary mixtures through intelligent systems". *Talanta* **144**, 363–368 (2015).

For Peer Review

8. J.S.Torrecilla, M.L. Mena, P. Yáñez-Sedeño and J. García, "Field determination of phenolic compounds in olive oil mill wastewater by artificial neural network," *Biochem. Eng. J.* **38** (2), 171–179 (2008).

9. J.S.Torrecilla, M.L. Mena, P. Yáñez-Sedeño and J. García, "Application of artificial neural network to the determination of phenolic compounds in olive oil mill wastewater," *J. Food Eng.* **81** (3), 544–552 (2007).

10. S. Faria, C. A. Rodrigues, R. Nunes and R. M. dos Santos, "Evaluation of extra virgin olive oil stability by artificial neural network," *Food Chem.* **179**, 35–43 (2015).

11. R. Furferi, L. Governi and Y. Volpe, "ANN-based method for olive Ripening Index automatic prediction," *J. Food Eng.*, **101**, 318–328 (2010).

12. R. Furferi, M. Carfagni and M. Daou, "Real-time estimation of peroxides and acidity level of extra-virgin olive oil: an integrated approach," *Int. J. Math. Comput. Simul.* **2** (2)(2008).

13. R. Furferi, M. Carfagni and M. Daou, "Artificial neural network software for real-time estimation of olive oil qualitative parameters during continuous extraction," *Comput. Electron. Agric.* **55**, 115–131 (2007).

14. A. Jiménez, M.P. Aguilera, M.Uceda and G. Beltrán, "Neural network as tool for virgin olive oil elaboration process optimization," *J. Food Eng.*, **95** (1), 135–141(2009).

15. A. Jiménez, G. Beltrán, M.P. Aguilera and M. Uceda, "A sensor-software based on artificial neural network for the optimization of olive oil elaboration process," *Sensors Actuators, B Chem.* **129** (2), 985–990 (2008).

16. Y.Allouche, E. Funes, G. Beltrán and A. Jiménez, "Near infrared spectroscopy and artificial neural network to characterise olive fruit and oil online for process optimisation," *J. Near Infrared Spectrosc.* **23**, 111–121 (2015).

17. A. Jiménez, M. Hermoso and M. Uceda, "Elaboración del aceite de oliva virgen mediante sistema continuo en dos fases. Influencia de diferentes variables del proceso en algunos parámetros relacionados con la calidad del aceite," *Grasas y Aceites*, **46** (4-5), 299–303 (1995).

For Peer Review

18. ISO 662:2016. Animal and vegetable fats and oils. Determination of moisture and volatile matter content. 2016.

19. Official Journal European Union. *Commission Implementing Regulation (EU) No. 1348/2013 amending Regulation (ECC) No 2568/91 on the characteristics of olive oil and olive-residue oil and on the relevant methods of analysis.* (2014).

20. M.I. Mínguez-Mosquera, B. Gandul-Rojas, A. Montaño-Asquerino and J. Garrido-Fernández, "Determination of chlorophylls and carotenoids by high-performance liquid chromatography during olive lactic fermentation," *J. Chromatogr.* **585**, 259–266 (1991).

21. A. Vázquez-Roncero, C. Janer del Valle and M.L. Janer del Valle, "Determinación de los polifenoles totales del aceite de oliva," *Grasas y Aceites* **24**, 350 (1973).

22. ISO 9936:2016. Animal and vegetable fats and oils. Determination of tocopherols and tocotrienols contents by High-performance liquid chromatography, p 16(2016).

23. P.C. Williams and D.C. Sobering, "How do we do it: a brief summary of the methods we use in developing near infrared calibrations," In *Near Infrared Spectroscopy: the Future Waves.*; A.M.C. Davies, P.C. Williams, Eds.; NIR Publications: Chichester, UK, pp 185–188 (1996).

24. P.C. Williams and D.C. Sobering, "Comparison of commercial Near-Infrared Transmittance and Reflectance instruments for analysis of whole grains and seeds," *J. Near Infrared Spectrosc.* **1**, 25–32 (1993).

25. J.A. Garcia, M. Hermoso and P. Cáceres, "Determination of oil and moisture in two-phases olive-pomace by using near-infreared spectroscopy," *Grasas y Aceites* **47**, 317–322 (1996).

26. B. Muik, B. Lendl, A. Molina-Díaz, L. Pérez-Villarejo and M.J. Ayora-Cañada, "Determination of oil and water content in olive pomace using near infrared and Raman spectrometry. A comparative study," *Anal. Bioanal. Chem.* **379**, 35–41 (2004).

27. A. García-Sánchez, N. Ramos Martos and E. Ballesteros, "Estudio comparativo de distintas técnicas analíticas (espectroscopía de NIR y extracción mediante

For Peer Review

Soxhlet) para la determinación del contenido graso y de humedad en aceitunas y orujo de Jaén", *Grasas y Aceites*, **56** (3), 220–227 (2005).

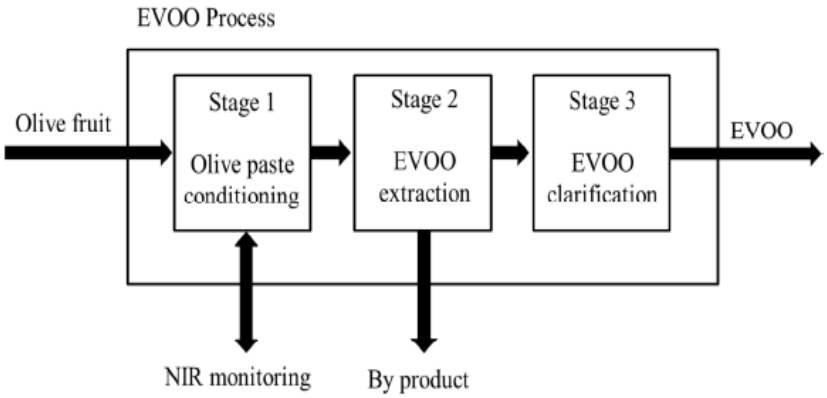
28. Bendini, A.; Cerretani, L.; Di Virgilio, F.; Belloni, P.; Lercker, G.; Toschi, T. G. In-process monitoring in industrial olive mill by means of FT-NIR. *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **2007**, *109*, 498–504.

29. A. Jiménez, A. Molina and M.I. Pascual, Using optical NIR sensor for on-line virgin olive oils characterization. *Sensors Actuators, B Chem.* ***107,*** 64–68 (2005).

30. A. Jiménez, "Monitoring carotenoid and chlorophyll pigments in virgin olive oil by visible-near infrared transmitance spectroscopy. On-line application," *J. Near Infrared Spectrosc.* **11**, 219–226 (2003).

For Peer Review

Fig. 1



For Peer Review

Table 1. Mechanical and technological process variables

Process style	Parameters	Abbreviation	Range values (Min-max)1
Paste conditioning	Olive fruits temperature (°C)	To	2.5-19.1
	Sieve diameter (mm)	Sd	4-7
	Rotational velocity (rpm)	Rv	2000-3000
	Paste temperature (°C)	Tm	9-36.7
	Paste time malaxer (minutes)	tm	35-175
	MTN addition (%)	MTN	0-1
Extraction centrifugation	Water addition (L/h)	Fw	0-200
	Paste flow (Kg/h)	Fp	460-1300
	Paste pool depth (mm)	L	0-27.5
	Oil overflow point (mm)	R1	98-101
EEVOO clarification vertical centrifuge	Oil temperature in (°C)	Toi	13-3.5
	Water temperature in (°C)	Twi	9.2-34
	Oil flow in (L/h)	Foi	58.5-511.9
	Water flow in(L/h)	Fwi	0-655.5

[1] For total experiments of n=693.

For Peer Review

Table 2. Analytical data of products outputs from the EVOO process.

Objectives (Products)	Parameters	Training data		Validation data	
		Range (min-max)	SD	Range(min-max)	SD
Extractability (Olive pomace)	Fat content (%)	1.66-5.89	0.72	2.15-5.92	0.7
	Moisture content (%)	51.57-63.47	3.52	56.98-75.42	3.48
EEVOO characteristics	Free acidity (% of oleic acid)	0.10-2.56	0.44	0.11-2.57	0.45
	I. Peroxides (mEq O_2/kg)	1.37-18.25	3.08	1.48-18.96	3.14
	K_{232}	1.29-2.70	0.19	1.09-2.64	0.20
	K_{270}	0.07-0.22	0.027	0.07-0.2	0.026
	Polyphenols T. (mg/kg)	80-502	89.82	80-502	90.04
	Carotenes (mg/kg)	2.8-11.7	1.91	2.7-11.6	1.27
	Chlorophylls (mg/kg)	0.8-15.6	2.97	0.9-15.2	2.95

For Peer Review

Table 3. Optimal ANN topologies obtained for Olive Pomace and EVOO characteristics.

Parameters	NT/NV[1]	ANN Training				ANN Validation			
		Layers-Neurons	Transfer Layer Functions	Training Function	Iterat.	r	RMSEP	RPD	RER
Olive Pomace									
Fat content (%)	462/231	57/5/1	Tsg/Tsg/PLn	Trp	185	0.90	0.31	2.42	12.16
Moisture (%)	462/231	83/16/1	Tsg/Tsg/ Tsg	Trp	185	0.90	1.56	2.23	11.84
EEVOO				Trp					
Free acidity (% of oleic acid)	394/197	40/14/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	250	0.98	0.09	5.06	27.73
I. Peroxides (mEq O_2/kg)	394/197	69/14/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	50	0.94	1.09	2.88	16.03
K_{232}	394/197	29/14/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	50	0.84	0.11	1.84	14.42
K_{270}	394/197	59/15/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	50	0.72	0.02	1.44	7.22
Polyphenols T. (mg/kg)	394/197	70/7/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	100	0.96	26.5	3.40	15.91
Carotenes pigments(mg/kg)	394/197	49/25/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	100	0.97	0.49	2.56	18.01
Chlorophylls pigments(mg/kg)	394/197	70/35/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	75	0.96	0.82	3.60	17.43

[1]NT: data numbers for training; NV: data number for validation;
Tsg:Tan-sigmoid transfer function; PLn: Linear transfer function; Lsg: Log-sigmoid transfer function; Trp: Resilient Backpropagation training function

For Peer Review

Table 4 Results of test applied to neural models of olive pomace.

Assay	Process conditions*										Olive Pomace Characteristics					
											Fat_a			$Moisture_a$		
	Sd	Rv	Rl	L	To	Tm	MTN	tm	Fw	Fp	Real	ANN	% E	Real	ANN	% E
1	4	2200	98	0	13	18.8	0	95	42	900	3.21	3.70	15.26	64.22	65.92	2.65
2	4	2200	98	0	14.9	24.4	0	80	115	910	2.75	2.39	13.09	61.01	62.38	2.25
3	5	2200	98	0	9.3	16.2	0	93	26.5	905	2.75	2.72	1.09	61.04	62.41	2.24
4	6	2200	98	0	2.6	13.4	0	70	80	960	3.42	3.43	0.29	63.94	61.46	3.88
5	5	2200	98	0	7.1	16.9	0	86	71	906	2.54	2.73	7.48	64.05	64.22	0.27

*Abbreviation accord Tab. 1; $_a$ all of results are expressed to %.; %E. Percent Error= |Real-ANN/Real|*100

For Peer Review

Table 5a). Process conditions at the assay of test for models of characteristics EVOO.

Assay	Process conditions*											
	Sd	Rv	Rl	L	To	Tm	MTN	tm	Fw	Fp	Foi	Fwi
1	4	2200	98	0	13	18.8	0	95	42	900	173	86
2	4	2200	98	0	14.9	24.4	0	80	115	910	90	22
3	5	2200	98	0	9.3	16.2	0	93	26.5	905	450	435
4	6	2200	98	0	2.6	13.4	0	70	80	960	141	528
5	5	2200	98	0	7.1	16.9	0	86	71	906	99	489

*Abbreviation accord Tab. 1

For Peer Review

Table 5.b) EVOO characteristics at assay of the test.

EEVOO Characteristics	Assay	1	2	3	4	5
Free acidity (%of oleic acid)	Real	0.22	0.22	0.23	0.17	0.14
	ANN	0.23	0.21	0.22	0.16	0.14
	% E	4.5	4.5	4.5	5.9	0.00
I. Peroxides (mEq O_2/kg)	Real	4.00	3.39	2.36	2.04	2.72
	ANN	3.86	3.39	2.69	2.26	2.65
	% E	3.50	0.00	13.98	10.78	2.57
K_{232}	Real	1.59	1.72	1.56	1.50	1.42
	ANN	1.60	1.63	1.51	1.49	1.42
	% E	0.63	5.23	3.21	0.67	0.00
K_{270}	Real	0.18	0.24	0.15	0.13	0.09
	ANN	0.18	0.19	0.14	0.13	0.11
	% E	0.00	20.83	6.67	0.00	22.2
Polyphenols (mg/kg)	Real	289	376	388	199	215
	ANN	309	354	351	185	226
	% E	6.92	5.85	9.54	7.04	5.12
Carotenes (mg/kg)	Real	11.6	19.1	12.7	12.7	14.5
	ANN	12.6	18.5	12.9	12.5	14.5
	% E	8.62	3.14	1.57	1.57	0.00
Chlorophylls (mg/kg)	Real	11.6	19.1	12.7	12.7	14.5
	ANN	13.0	18.4	12.0	13.4	14.7
	% E	12.07	3.66	5.51	5.51	1.38

For Peer Review

J_ID: Customer A_ID: JFPE12593 Cadmus Art: JFPE12593 Ed. Ref. No.: JFPE-2017-FEB-0076.R1 Date: 6-June-17 Stage: Page: 1

Received: 6 February 2017 | Revised: 24 April 2017 | Accepted: 30 May 2017

DOI: 10.1111/jfpe.12593

ORIGINAL ARTICLE

WILEY Journal of Food Process Engineering

Predictive ANN models for the optimization of extra virgin olive oil clarification by means of vertical centrifugation

Estrella Funes López[1] | Yosra Allouche[1] | Gabriel Beltrán[1] | M. Paz Aguliera[2] | Antonio Jiménez[1]

[1]IFAPA- Centro 'Venta del Llano', Ctra. Bailén- Motril km. 18.5, Mengíbar, Jaén 23620, Spain

[2]Citoliva Foundation, Technological Scientific Park Geolit. C/Sierra Morena, Planta Baja. Edif. CTSA, mod. 1 23620, Mengíbar, Spain

Correspondence
Estrella Funes López, Instituto Andaluz de Investigación y Formación Agraria, Pesquera, Alimentaria y de la Producción Ecológica (IFAPA), Junta de Andalucía, Centro 'Venta del Llano', Ctra. Bailén- Motril km. 18.5, 23620 Mengíbar, Jaén, Spain.
Email: estrellafulo84@gmail.com

Funding information
Junta de Andalucía Project, Department of Innovation (P10-AGR 6429 "Modelado y optimización del proceso de elaboración del aceite de oliva virgen. Proyecto I: Integración de sensores 'on-line' y técnicas de redes neuronales para la optimización del proceso").

Abstract

Eight artificial neural networks were developed as predictive models for regulated and nutritional parameters of oils obtained from vertical centrifugation. The networks were designed considering the NIR spectra of oily must at its exit from the horizontal decanter centrifuge, and the flows and temperatures of the oil and of the addition water. The results obtained in all the networks designed indicated the good creative capacity of the neural models through their quality indicators (RER and RPD). The correlations between the real data and those predicted by the networks were within the range of 0.76–0.99, the UV absorption networks (K_{232} and K_{270}) being those which gave lower correlations. For polyphenols, tocopherols and carotene and chlorophyll pigments, the t_e-Student external validation test makes a reliable prediction of these parameters. With predictive models, the vertical centrifuge can be modeled and regulated as well as monitored on-line to control and optimize the clarification phase within the extraction process of extra virgin olive oil (EVOO).

Practical applications

The predictive ANN can use to regulate and model the vertical centrifuge to obtain an EVOO of a maximum regulated and nutritional quality possible, reducing water and energy consumption. Besides, with on-line prediction of oil characterization, it will be possible to perform a correct classification prior to its storage in the cellar.

1 | INTRODUCTION

To obtain quality olive oil, the natural qualities of the olive's juice deserve maximum respect. This juice is obtained by a series of treatments to which the olive is subjected, from its cleaning and storage, through its grinding, on to the separation of its solid parts. Due to the extraction of the oil in a two-phase continuous system, the oil obtained presents a variable amount of moisture and impurities, which have to be removed. This fact, together with the increase in the production capacities of the processing lines, makes the clarification phase essential. The latter permits a fast separation of the undesirable phases so that the oil comes into contact with them for the shortest time possible. A poor execution in any of these phases can affect the quality of the oil and this is thus reflected in the chemical quality parameters (Masella, Parenti, Spugnoli, & Calamai, 2010). A deficient clarification may give rise to the appearance of undesirable fermentations in the tanks, and a deterioration in the sensorial characteristics of stored oil (Beltrán, Aguilera, Funes, & Jiménez, 2012).

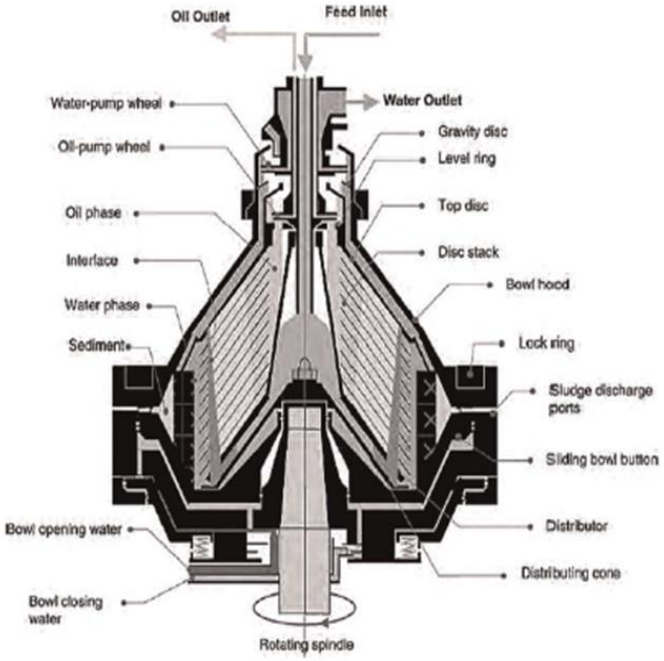
To carry out this clarification, water is added to the vertical centrifuge, which functions at a regime of 5,000–8,000 rpm according to its size, under the centrifugal force principle (It can observed in Figure 1). During the process, the centrifuge separates the solids in the oil, the water contained by the oil migrates to the addition water in the centrifuge, and the hydrosoluble compounds present in the oil diffuse toward the process water.

These phenomena are directly related to the regulation of the centrifuge and to the efficiency of the oil's clarification. The quality of the oil obtained fundamentally depends on this regulation, such as the loss of polyphenols due to an excessive addition of water, or the loss of aromas, among others, because of high oil temperatures and/or addition

Abbreviations: AOTF-NIR, acousto-optical tunable filters-near infrared; ANN, artificial neural network; EVOO, extra virgin olive oil; F_{oi}, oil flow to VC; F_f, feed flow to HCD; F_{wi}, water flow to VC; HCD, horizontal centrifuge decanter; RER, Relative Error Range; RMSEP, mean squared prediction error; RPD, Residual Predictive Deviation; T_{oi}, oil temperature at VC; T_{wi}, water temperature at VC; VC, vertical centrifuge.

ID: mohinderkumarb Time: 20:48 I Path: //chenas03.cadmus.com/Home$/mohinderkumarb/JUW-JFPE170052

J_ID: Customer A_ID: JFPE12593 Cadmus Art: JFPE12593 Ed. Ref. No.: JFPE-2017-FEB-0076.R1 Date: 6-June-17 Stage: Page: 2



AQ8 **FIGURE 1** Operating diagram of a vertical centrifuge

water(Cert, Alba, Pérez-Camino, Ruiz-Gómez, & Hidalgo, 1999; Jiménez et al., 2014; Masella, Parenti, Spugnoli, & Calamai, 2009).

Thus the control of the vertical centrifuge parameters can allow to modulate the characteristics of the olive oil especially those compounds related to the sensorial characteristics as phenols and volatiles compound affecting the partition coefficients of these compounds between the oil and water phases (Jiménez et al., 2014; Masella et al., 2009). Abenoza, Raso, Oria, and Sánchez-Gimeno (2016) described how those parameters affect the virgin olive oil debittering for those oil with a too strong bitter taste.

That is the reason why it is essential to control the oil:water ratio under certain temperature premises, which vary in accordance with the temperature and turbidity with which the oil enters the centrifuge (Jiménez, Hermoso, & Uceda, 1995).

In order for the pertinent regulations made in the vertical centrifuge to have the desired result, it is necessary to previously find out the characteristics of the oil obtained, and thus immediately control the centrifugation. One of the innovative technologies applied, which is capable of estimating on-line any parameter, is artificial neural networks. This is a mathematical algorithm with the ability to relate input and output parameters, training with examples across iterations without requiring any prior relationship between the process variables (Faria, Rodrigues, Nunes, & DOS Santos, 2015). Nowadays, there is an increase in this application of neural networks to solve complex problems. Sometimes it is combined with non-destructive, rapid, simple NIR technology, giving good results(Allouche, Funes López, Maza, & Márquez, 2015) since it is increasingly the one most used in oil analysis (Casale & Simonetti, 2014).

This work aimed to create neural models which could conform a control system with feedback and permit the modeling and controlling of the clarification phase. This modeling was based on the predictions made by the neural models of the different quality (acidity, peroxides, K_{232}, K_{270}) and nutritional (polyphenols, tocopherols, and pigments) parameters of the EVOO obtained.

With the on-line modeling of the VC, it is aimed to modify the technological variables influencing this stage in the process, and to achieve a "premium" EVOO with high nutritional values, produced sustainably with a saving in water and energy. In addition, residues in contact with the oils are diminished to prevent alterations in their quality. From then on, traceability in the cellar per qualities can be determined immediately, making a rational storage based on the differential characteristics of the oils.

2 | MATERIAL AND METHODS

2.1 | Plant material and extraction process

This work was carried out during three consecutive harvest seasons with "Picual" variety olives from the experimental farm at the IFAPA Centre "Venta del Llano" in Mengíbar (Jaén). The fruit was processed in

ID: mohinderkumarb Time: 20:48 I Path: //chenas03.cadmus.com/Home$/mohinderkumarb$/JW-JFPE170052

J_ID: Customer A_ID: JFPE12593 Cadmus Art: JFPE12593 Ed. Ref. No.: JFPE-2017-FEB-0076.R1 Date: 6-June-17 Stage: Page: 3

the experimental mill at the Centre. The latter is equipped with a continuous elaboration system as has been described in previous works (Allouche et al., 2015; Jiménez, Beltrán, Aguilera, & Uceda, 2008). The whole process was controlled by Procielo automation software (Procisa, España) (Jiménez Marquez, Aguilera, Herrera, Uceda Ojeda, & Beltrán Maza, 2009).

To be specific, the vertical centrifuge used is formed by a battery of truncated cone plates 59.24 mm in height, with a base diameter of 202 mm and 48.68° plate slope, the radius of the interface being situated at *Ri* = 87 mm. The working capacity of the VC is of 10 m^3/day at a speed of 7,500 rpm.

2.2 | Experimental sample collection

In this study, different assays were performed in which the technological variables affecting the clarification stage were progressively modified, that is, the oil and water flows and the temperatures of both. For each assay, spectral samples of oily must and of EVOO were collected in triplicate at the VC outlet.

The spectral samples were collected by the AOTF-NIR (Acousto-Optical Tunable Filters-Near Infrared) Luminar 5030 (Brimrose Corp.) system. This appliance is connected by optical fiber to a sensor located at the outlet of the horizontal decanter centrifuge before the vibratory sieve. It is programmed to make scans with a ratio of 10 scans s^{-1} at a spectral range of 1,100–2,500 nm at a resolution of 2 nm. The samples were collected with a lapse of time between them, to that they provided instantaneous information on the oily must which entered the VC to be clarified. Figure 2 shows some of the spectra taken under different process conditions.

After being clarified, olive oil samples were collected in triplicate per each assay at the outlet of the vertical centrifuge before being sent to the storage tanks. They were then filtered and stored at −15 °C for their subsequent chemical analysis.

2.3 | Chemical analysis

The parameters regulated (acidity, peroxide index, UV absorption) together with certain nutritional quality parameters, were analyzed.

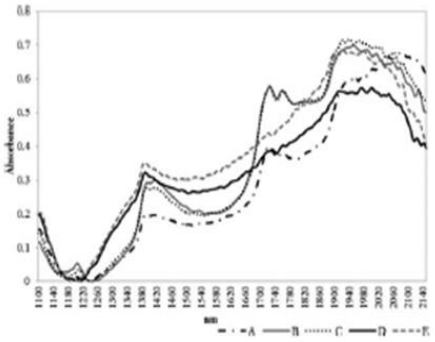


FIGURE 2 Different oily must spectra at the outlet of the horizontal decanter centrifuge under different process conditions

The degree of free fatty acids (% oleic acid), the level of peroxides (meqO_2 kg^{-1}) and the UV absorption coefficients 232 and 270 nm were determined in accordance with official COI methods (Official Journal European Union, 2014).

The determination of the polyphenols was carried out by the method described by Vázquez-Roncero, Janer DEL Valle, and Janer DEL Valle (1973) using the Folin-Ciocalteau reagent and measuring their absorbance at 725 nm obtaining the mg kg^{-1} of caffeic acid. To find out the mg of carotene and chlorophyll pigments per kg of oil, the Mínguez-Mosquera, Gandul-Rojas, Montaño-Asquerino, and Garrido-Fernández (1991) method was employed measuring their absorbance (470 and 670 nm).

To find out the content in tocopherols (mg kg^{-1}) the IUPAC 2432 method was followed. For this purpose, a liquid chromatograph equipped with an LC200 isocratic pump and a UV–vis Lc29 detector was used. The tocopherol concentrations were obtained with calibration lines of the standard solutions of patterns α, β y ɤ.

2.4 | Analysis and spectral treatment

The spectral data were exported to the program "The Unscrambler 9.7 (Camo Inc.)" in which a spectral treatment like the one described by Jiménez et al. (2008) was applied to them. This was to eliminate the effects of undesirable dispersion and to reduce the initial number of spectral points; the Savitzky-Golay 1ª derivative was applied to the spectra.

2.5 | Artificial neural networks

The ANNs created in this work were designed with Matlab software of the multilayer perceptron type, also known as "back-propagation." The ANN selected was "feed-forward" with horizontal predictions, with supervised learning and under the premises used in previous works (Allouche et al., 2015; Jiménez et al., 2008). Backpropagation is a supervised type of learning network, which employs a two-phase propagation-adaptation cycle. Once a pattern has been applied to the input of the network as a stimulus, this propagates from the first layer through the upper layers of the network until it generates an output. The output signal is compared to the output desired and a signal error is calculated for each of the outputs. The error outputs are propagated backwards, starting from the output layer toward the neurons of the hidden layer, which directly contribute to the output. However, the neurons of the hidden layer only receive a fraction of the total error signal, approximately based on the relative contribution of each neuron to the original output. This process is repeated, layer by layer, until all the neurons in the network have received an error signal describing their relative contribution to the total error. Based on the error signal perceived, the connection weights of each neuron are updated to make the network converge toward a state permitting the correct classification of all the training patterns.

The number of layers, of neurons per layer, transfer functions, the training algorithm, and the number of iterations were selected and analyzed in the training on the basis of a trial iteratively by varying it from *a* to *b* with a step of *x*. To verify the correct functioning of a network, the mean squared prediction error (RMSPE) (Equation 1) and the correlation coefficient (*r*) (Equation 2) between the laboratory reference

ID: mohinderkumarb Time: 20:48 I Path: //chenas03.cadmus.com/Home$/mohinderkumarb$/JW-JFPE170052

J_ID: Customer A_ID: JFPE12593 Cadmus Art: JFPE12593 Ed. Ref. No.: JFPE-2017-FEB-0076.R1 Date: 6-June-17 Stage: Page: 4

values and the values estimated by the network. Those parameters should be minimum and maximum ones, respectively

$$RMSEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_e - y_r)^2}{n-1}} \quad (1)$$

$$r = \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_e - \overline{y_e})(y_r - \overline{y_r})}{\left[\sum_{i=1}^{n}(y_e - \overline{y_e})^2 (y_r - \overline{y_r})^2\right]^{1/2}}, \quad (2)$$

y_e being the values estimated, y_r being the real ones, and n the number of samples in the database. Other parameters determining and confirming the oil's quality were the RPD (Equation 3) and RER (Equation 4) values.

$$RPD = \frac{SD}{RMSEP} \quad (3)$$

$$RER = \frac{\text{Rango Validación}}{RMSEP} \quad (4)$$

SD being the standard deviation of the reference data and Validation Range the range of values used in the validation.

RPD values of over 3 indicate an excellent prediction for analytical purposes, for quantitative analyses of 2.5–3. A network has a good calibration for use in the quality control of food products when the RER value is over 10 (Williams & Sobering, 1996).

The networks were additionally submitted to an external validation using the data corresponding to a different season (39 data). A statistical t_e-Student test was applied to the results obtained with a 95% interval of confidence to determine the existence of any significant differences between the values predicted by the ANNs and the real values obtained in the laboratory.

3 | RESULTS

3.1 | Inputs and outputs

For the creation of the ANNs which model the functioning of the VC, it was necessary to consider within the inputs the spectral data of the oily must, and the principal variables intervening in this clarification phase. In Figure 2, it can be observed how the spectra fluctuate depending on the characteristics of the oil, especially in terms of the moisture and amount of impurities it contains.

Table 1 shows their wide range of variation during the assays made during the years of the study.

Due to the influence of these variables on the characteristics of the final oils, they were used as inputs. The liposoluble nature of tocopherols and carotenes and the hydrosoluble nature of polyphenols and chlorophylls are well known. Therefore, controlling the adding of water to the VC becomes a very important factor since it could trigger the washing away of those parameters to a lesser or greater extent in terms of their volume. The same occurs with the temperature reached by the oil as an excessively high one could degrade these compounds. For that reason, the oil input and output temperatures must be controlled and regulated with the temperature of the water added to the VC.

With regard to the outputs, these correspond to a single output from the network, so that four ANNs were created for the on-line

TABLE 1 Range of the technological variables used to predict the characteristics of the EVOO at the outlet of the VC

Variables	Parameters	Abbreviation	Range values (Min–max)[a]
At entrance of VC	Oily must flow	F_{oi}	44–353
	Oily must temperature	T_{oi}	13.1–30.6
	Flow addition water	F_{wi}	27–656
	Temperature addition water	T_{wi}	9.3–29.5
At exit of VC	EVOO flow	F_{oo}	44–354
	EVOO temperature	T_{oo}	10.3–28.1

[a]F(L/h), T(°C).
[b]n = 105 data.

TABLE 2 Ranges of the EVOO parameters obtained in the laboratory with the reference methods

	Training data[a]		Validation data[b]	
Parameters	Range (min–max)	SD	Range(min–max)	SD
Free acidity (% acid oleic)	0.11–0.71	0.19	0.12–0.71	0.19
I. Peroxides ($meqO_2/kg$)	1.37–19.4	3.83	1.48–19.75	4.06
Absorption UV at 232 nm (K_{232})	1.38–2.75	0.27	1.41–2.86	0.33
Absorption UV at 270 nm (K_{270})	0.07–0.2	0.03	0.07–0.2	0.03
Total polyphenol (mg/kg)	104–515	117	105–505	118.6
Total tocopherol (mg/kg)	257–418	34	264–398	31.1
Carotenes (mg/kg)	2.8–8.6	1.47	2.8–8.4	1.6
Chlorophylls (mg/kg)	0.8–10.1	2.25	0.9–9.6	2.4

[a]n = 70.
[b]n = 35.

ID: mohinderkumarb Time: 20:49 I Path: //chenas03.cadmus.com/Home$/mohinderkumarb$/JWJFPE170052

J_ID: Customer A_ID: JFPE12593 Cadmus Art: JFPE12593 Ed. Ref. No.: JFPE-2017-FEB-0076.R1 Date: 6-June-17 Stage: Page: 5

TABLE 3 Optimal topologies of ANNS obtained to predict EVOO at the VC outlet and their validation data

		Training ANN				Validation ANN			
Parameters	NT/NV[a]	Layers-Neurons	Transfer Layer F.	Train. F.	Iters.	r	RMSEP	RPD	RER
Free acidity (%acid oleic)	70/35	23/11/1	Tsg/Tsg/Tsg	Trp	50	0.99	0.03	6.13	19.03
L Peroxides (meqO_2/kg)	70/35	23/11/1	Tsg/Tsg/Tsg	Trp	50	0.94	1.34	3.02	13.61
K_{232}	70/35	32/22/1	Lsg/Tsg/Tsg	Trp	50	0.86	0.17	1.94	8.54
K_{270}	70/35	32/22/1	Tsg/Tsg/Tsg	Trp	50	0.76	0.02	1.39	6.02
T. polyphenol (mg/kg)	70/35	25/11/1	Tsg/Tsg/Tsg	Trp	50	0.99	20	5.99	20.19
T. tocopherol(mg/kg)	70/35	35/22/1	Lsg/Tsg/Tsg	Trp	50	0.91	14	2.19	9.45
Carotenes (mg/kg)	70/35	23/11/1	Tsg/Tsg/Tsg	Trp	50	0.97	0.40	4.04	14.14
Chlorophylls(mg/kg)	70/35	23/11/1	Tsg/Tsg/Tsg	Trp	225	0.95	0.78	3.08	11.17

[a]NT: data numbers for training; NV: data number for validation.
Tsg = tan-sigmoid transfer function; Lsg = log-sigmoid transfer function; Trp = resilient Backpropagation training function.

prediction of the bioactive components (total polyphenols, total tocopherols, carotenes and chlorophylls) of the EVOO, which may vary to a great extent during the clarification. Four more models were also designed for the prediction of the regulated parameters (acidity, peroxides, K_{232}, K_{270}). Table 2 shows the levels at which those parameters varied throughout all the study years. With the on-line prediction of these parameters it is possible to classify the oils produced prior to their storage and conservation with the most homogeneous characteristics possible.

From the totality of the data (105), 70 corresponding to the first and third repetition of the samples were employed in the training. The rest (35) corresponding to the second repetition were used in the validation of the networks.

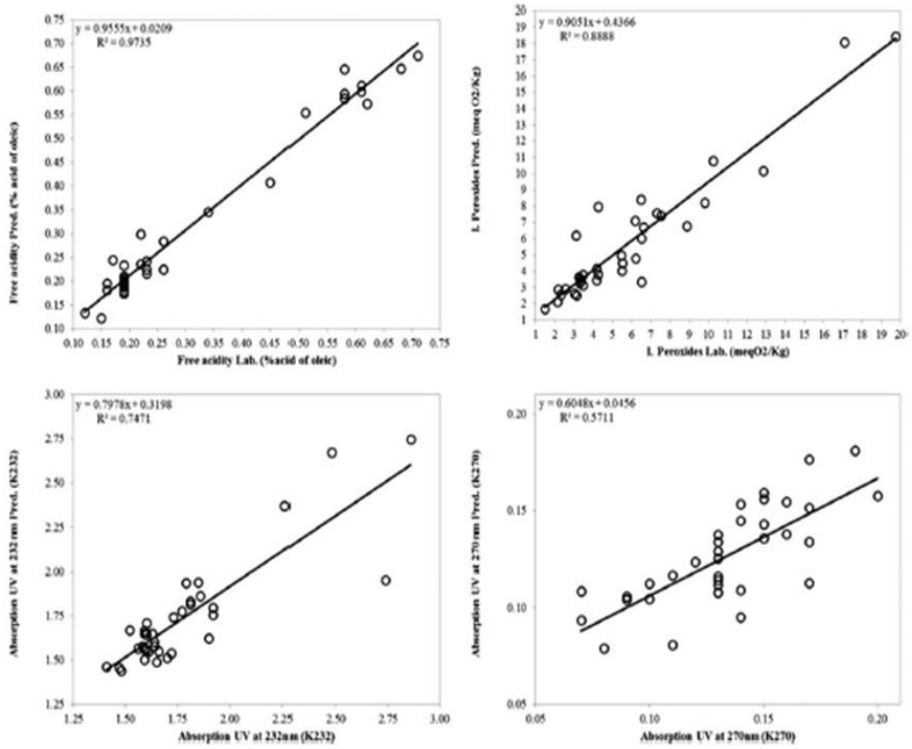


FIGURE 3 Correlation between the real data and those predicted by the networks for the regulated parameters

ID: mohinderkumarb Time: 20:49 I Path: //chenus03.cadmus.com/Home$/mohinderkumarb$/JW-JFPE170052

J_ID: Customer A_ID: JFPE12593 Cadmus Art: JFPE12593 Ed. Ref. No.: JFPE-2017-FEB-0076.R1 Date: 6-June-17 Stage: Page: 6

3.2 | ANN models for EVOO

The optimal topology found for each network can be seen in Table 3. Within the regulated parameters, the networks predicting the acidity and the peroxides found, in the 2:3/11/1 composition, the optimal combination of neurons in the hidden layers, with the tangent sigmoid transfer functions for each layer, training during 50 iterations with the "trainrp" function. Those networks obtained high correlations between the real and estimated data on the order of 0.99 and 0.94, respectively. Taking into account that the ranges in which both parameters have moved were within the extra virgin category, the prediction errors were not significant, and this was indicated by the t_a-Student made. The reliability of the networks was confirmed by the values of RPD > 3 and RER >10, which were higher than optimal ones.

For the UV absorption parameters, the networks designed coincided in their number of neurons per hidden layer, 32 and 22, and in the number of iterations made (50). However, they did not use the same combination of weight transfer functions between the inputs and the first hidden layer, logarithmic for K_{232} and tangential for K_{270}. An external validation was performed to which a 95% t_a-Student was applied, giving values of t_{cal} 0.1,−0.24, −0.78, and 0.24 against t_{crit} = 2.06 for acidity, peroxides, and absorption at 232 nm and 270 nm, respectively. The probabilities were also high, on the order of 0.92, 0.82, 0.44, and 0.81. Although, for these parameters, no significant differences were found, the quality of the predictions of both networks was not confirmed since the RPD values found were much lower than 3, with the highest value of RER obtained being 8.54. Figure 3 shows the correlations given by the different models designed for these components regulated.

In relation to the bioactive components of the EVOO, all the networks coincided in the number of neurons between hidden layers (11) except for the tocopherols, which obtained their best results with twice the number of neurons (22), in addition to using the logarithmic function to transfer weights between the input layer and the first hidden one. The rest of the networks used the combination "tansig"-"tansig"-"tansig" to transfer the information between the layers. With regard to the number of iterations that they made, all of them coincided in 50 with the networks of the regulated parameters. Only the network designed to estimate the chlorophyll pigments needed 225 iterations. The correlations obtained exceeded 0.9 between the estimated and the real data. Figure 4 shows the correlations given by the different models designed for these bioactive components. The quality parameters RPD and RER gave much higher values than the optimal ones, except for the predictive neural network model for tocopherols, which obtained RER = 9.45 very close to 10.

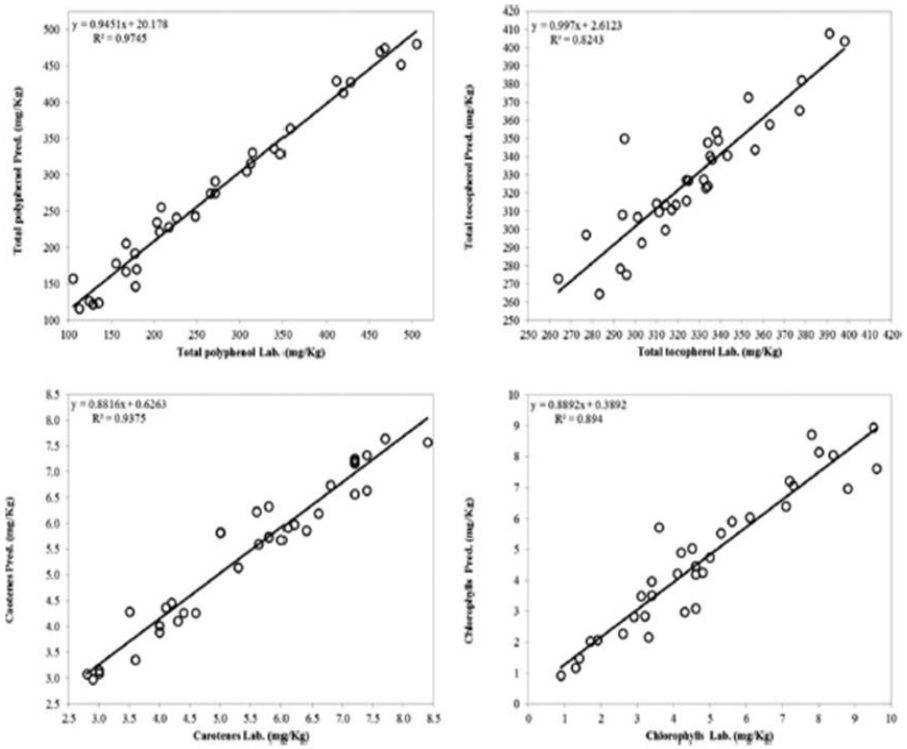


FIGURE 4 Correlation between the real data and those predicted by the networks for the bioactive components of the EVOO

ID: mohinderkumarb Time: 20:49 I Path: //chenas03.cadmus.com/Home$/mohinderkumarb$/JW-JFPE170052

J_ID: Customer A_ID: JFPE12593 Cadmus Art: JFPE12593 Ed. Ref. No.: JFPE-2017-FEB-0076.R1 Date: 6-June-17 Stage: Page: 7

TABLE 4 Examples of the internal validation of artificial neural networks and their error percentages

Parameters	At entrance of VC	Samples Spectra AOTF-NIR	A	B	C	D	E
Inputs		F_{wi} (L/h)	86	511	635	301	238
		F_{oi} (L/h)	173	165	80	144	146
		T_{wi} (°C)	14.5	14.1	13.6	33.3	12
		T_{oi} (°C)	21.3	22.3	20.5	24.4	16.7
	At exit of VC	F_{oo} (L/h)	155	167	120	185	156
		T_{oo} (°C)	18.4	15	14	27.8	13
Outputs	Free acidity	Data Lab.	0.22	0.17	0.17	0.22	0.23
	(% acid oleic)	Data ANN	0.19	0.17	0.17	0.20	0.20
		%error	13.6	0.0	0.0	9.1	13.0
	I. Peroxides	Data Lab.	4	2.5	2.01	3.06	3.06
	($meqO_2/kg$)	Data ANN	4.35	2.45	2.19	3.39	3.55
		%error	8.7	2.0	7.4	10.8	16.0
	UV absorption	Data Lab.	1.59	1.65	1.5	1.53	1.5
	at 232 nm (K_{232})	Data ANN	1.54	1.59	1.51	1.48	1.49
		%error	3.1	3.6	0.7	3.3	0.7
	UV absorption	Data Lab.	0.18	0.19	0.13	0.17	0.16
	at 270 nm (K_{270})	Data ANN	0.15	0.16	0.15	0.14	0.14
		%error	16.7	15.8	15.4	17.6	12.5
	Total polyphenol	Data Lab.	289	366	199	363	247
	(mg/kg)	Data ANN	323	378	165	365	221
		%error	11.8	3.3	17.1	0.6	10.5
	Total tocopherol	Data Lab.	382	406	353	420	399
	(mg/kg)	Data ANN	364	408	339	415	399
		%error	4.7	0.5	4.0	1.2	0.0
	Carotenes	Data Lab.	11.6	14.3	12.7	14	13.6
	(mg/kg)	Data ANN	10.2	13.6	12.7	12.9	13.4
		%error	12.1	4.9	0.0	7.9	1.5
	Chlorophylls	Data Lab.	15.4	19.3	19.5	17.3	16.4
	(mg/kg)	Data ANN	15.2	18.6	19.5	18.4	17.8
		%error	1.3	3.6	0.0	6.4	8.5

In the t_e-Student external validation test, the results were: $t_{cal} = -0.09, 0.34, 0.12, -0.01$, with values of $p = .93, .73, .9, .99$ for polyphenols, tocopherols, and carotene and chlorophyll pigments, respectively. No significant difference was found in that external validation. In view of all the above, it can be said that all the predictive models make a reliable prediction of the parameters for which they have been designed.

However, considering the heterogeneity presented by all the parameters, some examples of that variability and the behavior of the neural models for each parameter observed in Table 4 were selected. The percentage of error between the values predicted and the real values appear in that table. However, there have been very few works with which to compare this study. Several authors have studied different ways to determine rapidly some of the EVOO characteristics, although they could not be comparable to working with intact olives in many cases(Cayuela, Yousfi, Carmen Martínez, & García, 2014; Furferi, Carfagni, & Daou, 2008, 2007; Furferi, Governi, & Volpe, 2010; Salguero-Chaparro, Baeten, Fernández-Pierna, & Peña-Rodríguez, 2013; Salguero-Chaparro & Peña-Rodríguez, 2014). Other acceptable predictive models were developed by means of PLS analysis and an NIR system to measure on-line the pigment levels contained in EVOO at the VC outlet (Jiménez Marquez, 2003). On considering the difference in the methodology and the totality of the samples used in both cases, *r* values slightly higher than those of this study were obtained although the prediction errors were practically the same. In studies prior to this work (Allouche et al., 2015), predictive models taking ANNs have been created to estimate the principal characteristics of the oil. Good prediction results were found, although they cannot be compared since the oils characterized were obtained on a laboratory scale and the networks did not consider the same variables or spectral data.

It has been verified how ANNs are used in other industrial processes for their modeling. Behroozi Khazaei, Tavakoli, Ghassemian, Khoshtaghaza, and Banakar (2013) introduced a new method for the predictive modeling of the grape drying process. With the aid of an artificial vision machine, ANNs were created which they used in monitoring on-line and the control of this process.

4 | CONCLUSIONS

Based on the results obtained in this work, it can be concluded that the models obtained by the combination of the AOTF-NIR and RNA systems are acceptable and necessary for on-line prediction of the principal regulated parameters, together with the bioactive components of the EVOO at the end of the clarification stage. The predictive model for polyphenols, tocopherols and carotene and chlorophyll pigments give fitted prediction of those parameter and help to modulate the virgin olive oil bioactive and sensorial characteristics. Thus, it will be

ID: mohinderkumarb Time: 20:49 I Path: //chenas03.cadmus.com/Home$/mohinderkumarb$/JW-JFPE170052

J_ID: Customer A_ID: JFPE12593 Cadmus Art: JFPE12593 Ed. Ref. No.: JFPE-2017-FEB-0076.R1 Date: 6-June-17 Stage: Page: 8

possible to regulate and model the vertical centrifuge to obtain an EVOO of a maximum regulated and nutritional quality possible, reducing water and energy consumption. Besides, with on-line prediction of oil characterization, it will be possible to perform a correct classification prior to its storage in the cellar.

ACKNOWLEDGMENTS

This work is supported by the Project P10-AGR 6429 "Modelado y optimización del proceso de elaboración del aceite de oliva virgen. Proyecto I: Integración de sensores 'on-line' y técnicas de redes neuronales para la optimización del proceso," funded by the department of innovation from Junta de Andalucía.

CONFLICT OF INTEREST

The authors have declared no conflict of interest.

REFERENCES

Abenoza, M., Raso, J., Oria, R., & Sánchez-Gimeno, A. C. (2016). Debittering olive oil by liquid–liquid extraction: Kinetics and the effect on the quality of Arbequina olive oil. *European Journal of Lipid Science and Technology*, *118*, 1243–1249.

Allouche, Y., Funes López, E., Maza, G. B., & Márquez, A. J. (2015). Near infrared spectroscopy and artificial neural network to characterise olive fruit and oil online for process optimisation. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, *23*, 111–121. doi:10.1255/jnirs.1155

Behroozi Khazaei, N., Tavakoli, T., Ghassemian, H., Khoshtaghaza, M. H., & Banakar, A. (2013). Applied machine vision and artificial neural network for modeling and controlling of the grape drying process. *Computers and Electronics in Agriculture*, *98*, 205–213.

Beltrán, G., Aguilera, M. P., Funes, E., & Jiménez, A. (2012). Eliminación automática de las borras en depósitos de almacenamiento. Efecto sobre la calidad del aceite. *Mercacei*, *72*, 191.

Casale, M., & Simonetti, R. (2014). Review: Near infrared spectroscopy for analysing olive oils. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, *22*, 59–80.

Cayuela, J. A., Yousfi, K., Carmen Martínez, M., & García, J. M. (2014). Rapid determination of olive oil chlorophylls and carotenoids by using visible spectroscopy. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, *91*, 1677–1684.

Cert, A., Alba, J., Pérez-Camino, M. C., Ruíz-Gómez, A., & Hidalgo, F. (1999). Influencia de los sistemas de extracción sobre las características y los componenetes menores del aceite de oliva virgen extra. *Olivae*, *79*, 41.

Faria, S., Rodrigues, C. A., Nunes, R., & DOS Santos, R. M. (2015). Evaluation of extra virgin olive oil stability by artificial neural network. *Food Chemistry*, *179*, 35–43.

Furferi, R., Carfagni, M., & Daou, M. (2007). Artificial neural network software for real-time estimation of olive oil qualitative parameters during continuous extraction. *Computers and Electronics Agriculture*, *55*, 115–131.

Furferi, R., Carfagni, M., & Daou, M. (2008). Real-time estimation of peroxides and acidity level of extra-virgin olive oil: An integrated approach. *International Journal of Mathematical Computer Simulation*, *2*, 206–214.

Furferi, R., Governi, L., & Volpe, Y. (2010). ANN-based method for olive Ripening Index automatic prediction. *Journal of Food Engineering*, *101*, 318–328.

Jiménez, A., Beltrán, G., Aguilera, M. P., & Uceda, M. (2008). A sensor-software based on artificial neural network for the optimization of olive oil elaboration process. *Sensors Actuators, B Chemistry*, *129*, 985–990.

Jiménez, A., Gila, A., Bejaoui, M. A., Aguilera, M. P., Sánchez, A., & Beltrán, G. (2014). La reducción de agua en la centrifugación vertical mejora la calidad del AOVE. Olimerca.

Jiménez, A., Hermoso, M., & Uceda, M. (1995). Elaboración del aceite de oliva virgen mediante sistema continuo en dos fases. Influencia de diferentes variables del proceso en algunos parámetros relacionados con la calidad del aceite. *Grasas y Aceites*, *46*, 299–303.

Jiménez Marquez, A. (2003). Monitoring carotenoid and chlorophyll pigments in virgin olive oil by visible-near infrared transmittance spectroscopy. On-line application. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, *11*, 219–226.

Jiménez Marquez, A., Aguilera Herrera, M. P., Uceda Ojeda, M., & Beltrán Maza, G. (2009). Neural network as tool for virgin olive oil elaboration process optimization. *Journal of Food Engineering*, *95*, 135–141.

Masella, P., Parenti, A., Spugnoli, P., & Calamai, L. (2009). Influence of vertical centrifugation on extra virgin olive oil quality. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, *86*, 1137–1140.

Masella, P., Parenti, A., Spugnoli, P., & Calamai, L. (2010). Nitrogen stripping to remove dissolved oxygen from extra virgin olive oil. *European Journal of Lipid Science and Technology*, *112*, 1389–1392.

Mínguez-Mosquera, M. I., Gandul-Rojas, B., Montaño-Asquerino, A., & Garrido-Fernández, J. (1991). Determination of chlorophylls and carotenoids by high-performance liquid chromatography during olive lactic fermentation. *Journal of Chromatography*, *585*, 259–266.

Official Journal European Union. (2014). Commission Implementing Regulation (EU) No. 1348/2013 amending Regulation (ECC) No 2568/91 on the characteristics of olive oil and olive-residue oil and on the relevant methods of analysis. AQ6

Salguero-Chaparro, L., Baeten, V., Fernández-Pierna, J. A., & Peña-Rodríguez, F. (2013). Near infrared spectroscopy (NIRS) for on-line determination of quality parameters in intact olives. *Food Chemistry*, *139*, 1121–1126. doi:10.1016/j.foodchem.2013.01.002

Salguero-Chaparro, L., & Peña-Rodríguez, F. (2014). On-line versus off-line NIRS analysis of intact olives. *LWT- Food Science Technology*, *56*, 363–369.

Vázquez-Roncero, A., Janer DEL Valle, C., & Janer DEL Valle, M. L. (1973). Determinación de los polifenoles totales del aceite de oliva. *Grasas y Aceites*, *24*, 350.

Williams, P. C., & Sobering, D. C. (1996). How do we do it: a brief summary of the methods we use in developing near infrared calibrations. In A.M.C. Davies & P.C. Williams, (Eds.), *Near infrared spectroscopy: The future waves* (pp. 185–188). Chichester, UK: NIR Publications.

How to cite this article: Funes López E, Allouche Y, Beltrán G, Aguilera MP, Jiménez A. Predictive ANN models for the optimization of extra virgin olive oil clarification by means of vertical centrifugation. *J Food Process Eng*. 2017;e12593. https://doi.org/10.1111/jfpe.12593

ID: mohinderkumarh Time: 20:49 I Path: //chenas03.cadmus.com/Home$/mohinderkumarh$/JW-JFPE170062

Congreso internacional

Eurofedlipid 2014

REDES NEURONALES ARTIFICIALES EN LA PREDICCIÓN DE LAS CALIDADES DEL ACEITE DE OLIVA A PARTIR DE LA PASTA DE ACEITUNA"

Estrella Funes[1], Yosra Allouche[1], Gabriel Beltrán[1], Antonio Jiménez[1].
[1]IFAPA "Venta del Llano" Ctra. Bailen- Motril, km 18,4. 23620. Mengibar (Jaén).
Email: estrellab.funes@juntadeandalucia.es

IFAPA

INTRODUCTION

Virgin olive oil is obtained from the olive fruit (Olea europaea L.) by exclusive use of physical procedures. In the solid–liquid phase separation, that is carried out into a Horizontal Centrifugal Decanter (HCD) the virgin olive oil is separated from the water and solid matter but not totally. Which olive oil have a little among of moisture and impurities together polyphenols content at the output of HCD determinate to quality of olive oil.

OBJECTIVES

This work try to develop models based on artificial neural networks (ANNs) to predict on-line of the moisture, impurities and polyphenols content of olive oil extracted by a continuous extraction process at the output of horizontal centrifugal decanter (HCD). ANNs can be used for an automatic control of an oil mill optimizing the HCD operation function of olive characteristics at entrance of the mill and the characteristic of desired olive oil to obtain. Which ANNs were developed with dates of four year.

MATERIALS AND METHODS

- In this work were carried out with the continuous system of two phases installed in "Venta del Llano" IFAPA Centre using olive fruit used were of 'Picual variety' during the whole campaign.
- The sample triplicate olive oils were gathered at the output of HCD. The moisture, impurities and polyphenols content were analyzed for official methods.
- Oil spectrums from output HCD were collected by an acousto-optic tunable filter near infrared (AOTF-NIR) and pretreated with wavelet system.
- The ANNs created were based on the algorithm 'feed-forward back-propagation' with a supervised learning of descending gradients using Matlab software with different inputs and outputs.

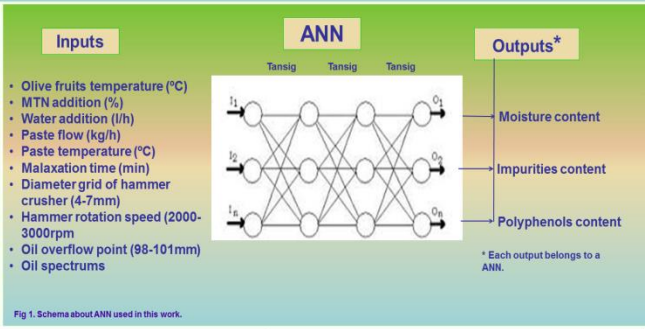


Fig 1. Schema about ANN used in this work.

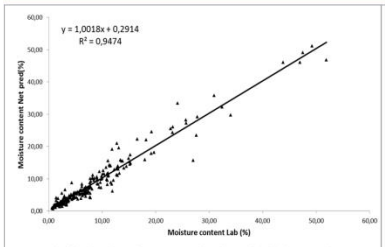


Fig.2 Scatter plot of lineal correlation of moisture content olive oil ANN predicted vs laboratory analysis on moisture content olive oil.

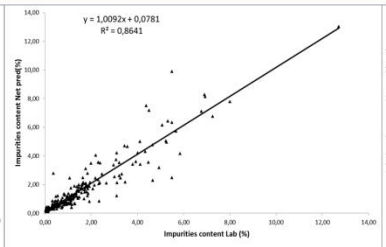


Fig.3 Scatter plot of lineal correlation of impurities content olive oil ANN predicted vs laboratory analysis on impurities content olive oil.

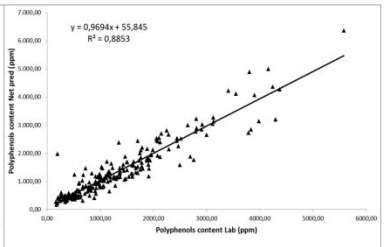


Fig.3 Scatter plot of lineal correlation of polyphenols content olive oil ANN predicted vs laboratory analysis on polyphenols content olive oil.

RESULTS AND DISCUSSION

The results obtained showed a highly linear correlation into the predicted and the real laboratory values, with values of r = 0.97336, r = 0.9295 and r = 0.94093 and the errors prediction (RMSE) 2.055, 0.706 and 337.994 for moisture, impurities and polyphenols content respectively and whose the ranges were 53-0.6%, 14-0.03% and 7227-135ppm. In the next figures, a comparison between the values real and predicted by ANN can be observed for parameters moisture, impurities and polyphenols content in olive oil at output DCH which values were close to 1.

CONCLUSIONS

After to observer the results, the main conclusions was that the capacity of ANN to predict these parameters was very high, so this predict model can optimize of Decanter performance to avoid of olive oil wastage to pomace, keeping the qualities proprieties of oil olive during this step of elaboration process. Also the ANNs could use to performance of others machine form part of step of olive oil elaboration process.

REFERENCES:
- Jiménez, A., Aguilera, M.P., Uceda, M., Beltrán, G., Neural network as tool for virgin olive oil elaboration process optimization. *J. Food Eng.*, 2009, 95, 135–141.
- Jiménez, A., Beltrán, G., Aguilera, M.P., Uceda, M., A sensor-software based on artificial neural network for the optimization of the olive oil elaboration process. *Sensor Actuator*, 2008, 129, 985–99
- Furferi, R., Carfagni, M., Daou, M., Artificial neural network software for real time estimation of olive oil qualitative parameters during continuous extraction. *Comput. Electron. Agr.*, 2007, 55 (2), 11 131.

JUNTA DE ANDALUCIA

Instituto de Investigación y Formación Agraria y Pesquera
CONSEJERÍA DE AGRICULTURA, PESCA Y MEDIO AMBIENTE

Unión Europea

Congreso internacional

Expoquímia 2014

"OPTIMIZE OF HORIZONTAL CENTRIFUGE DECANTER PERFORMANCE TO AVOID OF FAT LOSS IN OLIVE POMACE USING ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS."

Estrella Funes[1], Yosra Allouche[1], Gabriel Beltrán[1], Antonio Jiménez[1].
[1]IFAPA "Venta del Llano" Ctra. Bailen- Motril, km 18,4. 23620. Mengíbar (Jaén).
Email: estrellab.funes@juntadeandalucia.es

IFAPA

INTRODUCTION

The production of virgin olive oil is a process that consists of several stages, depends on a large number of varying technological and presents various control objectives. The use of virtual sensors in strategic places of the process line avoid through technical non-invasive non-destructive and multiparametric as AOTF-NIR (acousto-optic tunable filter near infrared) and combination with ANNs can optimize the process.

OBJECTIVES

The goal of this research work is to develop models based on artificial neural networks (ANNs) to predict on-line of the fat content pomace and moisture pomace content of pomace extracted at the output of horizontal centrifugal decanter (HCD) during the extraction process of olive oil. Which predictions can be used to optimize automatic control of an oil mill and to obtain so an olive oil with defined characteristics. Dates of fours years were used to this work.

MATERIALS AND METHODS

- For this research the 'Picual variety olive fruit were processed in a continuous system of two phases installed in "Venta del Llano" IFAPA Centre during the whole campaign.
- The fat content pomace and moisture pomace content were analyzed for official methods. These samples were taken for triplicate at the output of HCD of pomace.
- Paste olive fruit spectrums from input HCD were collected by AOTF-NIR and pretreated with wavelet system.
- Two ANNs created were based on the algorithm 'feed-forward back-propagation' with a supervised learning of descending gradients using Matlab software with different outputs.

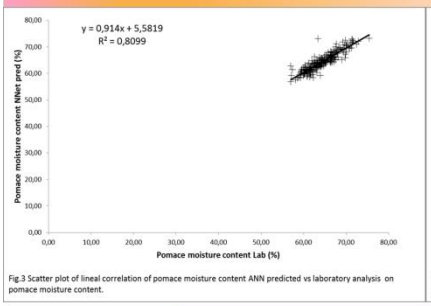


Fig.3 Scatter plot of lineal correlation of pomace moisture content ANN predicted vs laboratory analysis on pomace moisture content.

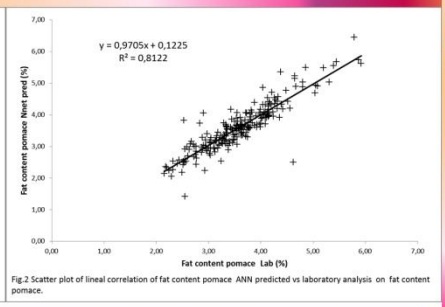


Fig.2 Scatter plot of lineal correlation of fat content pomace ANN predicted vs laboratory analysis on fat content pomace.

Inputs to creat ANN

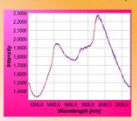
Technological variables

- Olive fruits temperature: 2.5-22.8ºC
- MTN addition: 0-1 %
- Water addition: 0-200l/h
- Paste flow: 460-1300 kg/h
- Paste temperature: 9-36.7ºC
- Malaxation time: 35-175min

Mechanical variables

- Diameter grid of hammer crusher: 4-7mm
- Hammer rotation speed: 2000-3000 rpm
- Oil overflow point: 98-101mm

Paste olive fruit spectrums



Outputs to creat ANN

- Fat content pomace: 1.5-6%
- Pomace moisture content : 51-78%

RESULTS AND DISCUSSION

The results obtained showed a highly linear correlation into the predicted and the real laboratory values, with values of r = 0.9012 and r = 0.8997 and the errors prediction (RMSE) 0.0327 and 1.5687 for fat content pomace and moisture pomace respectively and with ranges of 5.5-1.7% and 77-51.6%. The figures show a coefficient of determination (R2) very high close one between the values real and predicted as pomace moisture content and fat content pomace in pomace at output DCH.

CONCLUSIONS

With those results the goal conclusions of this research was the capacity predictive that ANNs have to know on-line parameters that influence in the operation of process. That ability could be a great tool to make a regulation of DCH to avoid of olive oil wastage to pomace, without influence the characteristics of obtained oil olive.

REFERENCES:
- Jiménez, A., Aguilera, M.P., Uceda, M., Beltrán, G., Neural network as tool for virgin olive oil elaboration process optimization. *J. Food Eng.*, 2009, 95, 135–141.
- Jiménez, A., Beltrán, G., Aguilera, M.P., Uceda, M., A sensor-software based on artificial neural network for the optimization of the olive oil elaboration process. *Sensor Actuator*, 2008, 129, 985–990.
- Furferi, R., Carfagni, M., Daou, M., Artificial neural network software for real time estimation of olive oil qualitative parameters during continuous extraction. *Comput. Electron. Agr.*, 2007, 55 (2), 115–131.

JUNTA DE ANDALUCIA

Instituto de Investigación y Formación Agraria y Pesquera
CONSEJERÍA DE AGRICULTURA, PESCA Y MEDIO AMBIENTE

Unión Europea

IV Jornadas Nacionales del Grupo de Olivicultura de la Sociedad Española de Ciencias Hortícolas. Baeza (1)

"REDES NEURONALES ARTIFICIALES EN LA PREDICCIÓN DE LAS CALIDADES DEL ACEITE DE OLIVA A PARTIR DE LA PASTA DE ACEITUNA"

Estrella Funes[1], Yosra Allouche[1], Gabriel Beltrán[1], Antonio Jiménez[1].
[1]IFAPA "Venta del Llano" Ctra. Bailen- Motril, km 18,4. 23620. Mengíbar (Jaén).
Email: estrellab.funes@juntadeandalucia.es

IFAPA

INTRODUCCIÓN

El aceite de oliva virgen es obtenido de la aceituna (Olea europaea L.) exclusivamente por procedimientos físicos. En la fase de separación sólido-líquido, que se lleva a cabo en la centrifuga horizontal conocido como Decanter (HCD) el aceite de oliva virgen es separado de la sólidos en forma de orujo yéndose con éste parte del agua pero el resto del agua y parte de algunas impurezas quedan unidas al aceite. Dicha cantidad de agua, impurezas y el contenido de polifenoles que contiene ese aceite a la salida del decanter van a determinar la calidad del mismo.

OBJECTIVOS

Este trabajo intenta desarrollar modelos basados en redes neuronales artificiales (RNAs) para predecir a tiempo real el contenido de humedad, impurezas y de polifenoles que posee el aceite de oliva extraído a la salida del decanter durante un proceso de extracción en continuo. RNAs pueden ser usadas para el control automático del proceso en una almazara optimizando el funcionamiento del decanter en función de las características deseadas del aceite a obtener. Las redes neuronales artificiales han sido desarrollados con datos procedentes de cuatro campañas agrícolas.

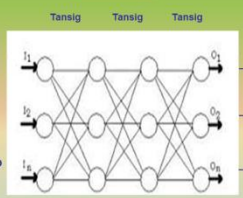
MATERIALES Y MÉTODOS

- Este trabajo se ha llevado a cabo con un sistema continuo de dos fases instalado en el IFAPA "Venta del Llano" usando aceitunas de la variedad Picual de la finca perteneciente al mismo centro durante cada campaña agrícola.
- Las muestras de aceite fueron recogidas por triplicado a la salida del decanter y analizadas en el laboratorio conforme a lo que la normativa vigente establece para los parámetros de humedad, impurezas y contenido en polifenoles.
- Por cada muestra de aceite se recogieron al mismo tiempo espectros mediante un equipo de infrarrojo cercano AOTF-NIR (acousto-optic tunable filter near infrared) y posteriormente fueron pre tratados con el sistema wavelet.
- Las RNAs creadas se basaron en el algoritmo 'feed-forward back-propagation' con un entrenamiento supervisado de gradientes descendientes usando el software Matlab con diferentes inputs y outputs.

Inputs

- Temperatura de la aceituna (ºC)
- Adición de MTN (%)
- Adición de agua (l/h)
- Ritmo de la pasta (kg/h)
- Temperatura de la pasta(ºC)
- Tiempo de batido (min)
- Diámetro de criba del molino de martillos (4-7mm)
- Velocidad de rotación del molino (2000-3000rpm)
- Salida del aceite del decanter (98-101mm)
- Espectros del aceite

ANN



Outputs*

- Contenido de humedad
- Contenido de impurezas
- Contenido de polifenoles

* Cada output pertenece a una RNA.

Fig 1. Esquema de la RNA usada en este trabajo..

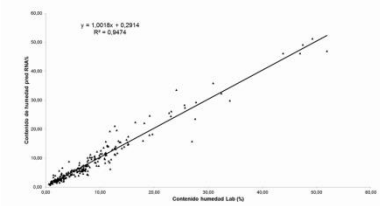


Fig.2. Gráfico de la correlación lineal entre el contenido de humedad del aceite a la salida del decanter predicho por RNA y el contenido de humedad del aceite obtenido en el laboratorio.

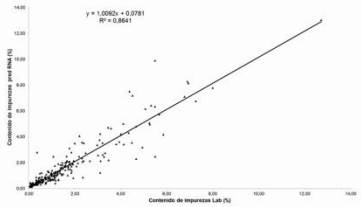


Fig.3 Gráfico de la correlación lineal entre el contenido de impurezas del aceite a la salida del decanter predicho por RNA y el contenido de impurezas del aceite obtenido en el laboratorio

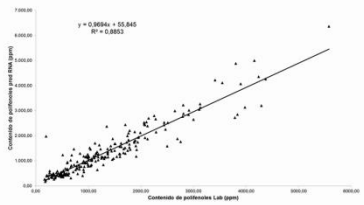


Fig. 4 Gráfico de la correlación lineal entre el contenido de polifenoles del aceite a la salida del decanter predicho por RNA y el contenido de polifenoles del aceite obtenido en el laboratorio

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Los resultados obtenidos muestran una alta correlación linear entre los valores reales obtenidos en el laboratorio y los valores predichos, con valores de r = 0.97336, r = 0.9295 and r = 0.94093 y con errores de predicción (RMSE) 2.055, 0.706 y 337.994 para el contenido de humedad, impurezas y polifenoles respectivamente y cuyos rangos fueron 53-0.6%, 14-0.03% y 7227-135ppm. En las siguientes figuras se puede observar una comparación entre los valores reales y los predichos por cada RNA para cada parámetro y con valores cercanos a 1. Cada RNAs fue diferente en cuanto al número de neuronas o incluso a la función de transferencia.

CONCLUSIONES

Después de observar los resultados, la principal conclusión fue que la capacidad que posee la RNA para predecir estos parámetros a tiempo real es muy alta, por lo que se podría decir que este modelo de predicción puede optimizar el funcionamiento decanter para evitar al máximo las posibles pérdidas de aceite que se van junto al orujo, manteniendo a su vez las propiedades de calidad del aceite de oliva durando esta fase de elaboración. Además las redes neuronales artificiales podrían usarse para optimizar otras partes del proceso.

REFERENCES:
- Jiménez, A., Aguilera, M.P., Uceda, M., Beltrán, G., Neural network as tool for virgin olive oil elaboration process optimization. *J. Food Eng.*, 2009, 95, 135–141.
- Jiménez, A., Beltrán, G., Aguilera, M.P., Uceda, M., A sensor-software based on artificial neural network for the optimization of the olive oil elaboration process. *Sensor Actuator*, 2008 129, 985–990.
- Furferi, R., Carfagni, M., Daou, M., Artificial neural network software for real time estimation of olive oil qualitative parameters during continuous extraction. *Comput. Electron. Agr.*, 2007, 55 (2), 115–131.

JUNTA DE ANDALUCIA

Instituto de Investigación y Formación Agraria y Pesquera
CONSEJERÍA DE AGRICULTURA, PESCA Y MEDIO AMBIENTE

Unión Europea

IV Jornadas Nacionales del Grupo de Olivicultura de la Sociedad Española de Ciencias Hortícolas. Baeza (2)

"EL USO DE LA INTELIGENCIA ARTIFICIAL PARA CONSEGUIR EL MÁXIMO AGOTAMIENTO DEL ORUJO SIN PÉRDIDAS DE CALIDAD DEL ACEITE"

Estrella Funes[1], Yosra Allouche[1], Gabriel Beltrán[1], Antonio Jiménez[1].
[1]IFAPA "Venta del Llano" Ctra. Bailen- Motril, km 18,4. 23620. Mengíbar (Jaén).
Email: estrellab.funes@juntadeandalucia.es

IFAPA

INTRODUCCIÓN

La producción del aceite de oliva virgen consta de varias fases que depende cada una de un gran número de variables tanto tecnológicas como mecánicas y que dependen a su vez del aceite que se pretenda conseguir así como el estado de la materia prima. El uso de sensores virtuales colocados en sitios estratégicos de la línea del proceso a través de técnicas no invasivas ni destructivas y multiparamétricas como es el sistema AOTF-NIR (acousto-optic tunable filter near infrared) y la combinación de Redes Neuronales Artificiales (RNAs) pueden conseguir una buena optimización del proceso.

OBJECTIVOS

El principal objetivo de este estudio es desarrollar modelos basados en RNAs para predecir en tiempo real los parámetros más importantes que posee el orujo a su salida del decanter como son el contenido graso y el de humedad del orujo. Con estas predicciones se podría optimizar el control automático de ciertas variables tecnológicas y/o mecánicas para obtener la máxima cantidad de aceite con las mínimas pérdidas sin que afecten a su calidad.

MATERIALES Y MÉTODOS

- Para la realización de este ensayo se han utilizado aceitunas de la variedad Picual que fueron procesadas en un sistema continuo de dos fases instalado en el IFAPA "Venta del Llano". Los ensayos se llevaron a cabo durante la campaña agrícola y fueron repetidos durante cuatro campañas.
- A las muestras de orujo recogidas por triplicado a la salida del decanter se le analizaron el contenido graso y la humedad conforme a la normativa vigente.
- Simultáneamente a la recogida de muestras se recogieron datos espectrales de la masa a la entrada del decanter por un sistema AOTF-NIR y pre tratados con el sistema and wavelet.
- Se crearon dos redes neuronales artificiales basadas en el algoritmo 'feed-forward back-propagation' con un entrenamiento supervisado de gradientes descendientes usando el software Matlab. Cada red al tener outputs diferentes fueron distintas en su número de neuronas.

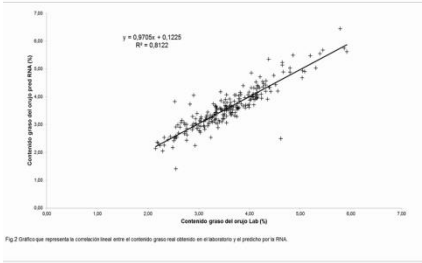


Fig.2 Gráfico que representa la correlación lineal entre el contenido graso real obtenido en el laboratorio y el predicho por la RNA.

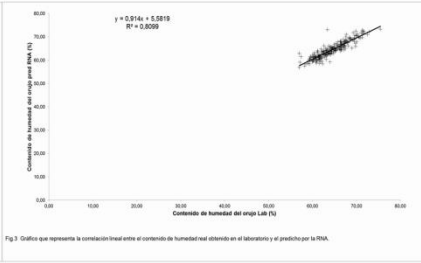


Fig.3 Gráfico que representa la correlación lineal entre el contenido de humedad real obtenido en el laboratorio y el predicho por la RNA.

Inputs para crear la RNA

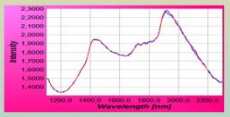
Variables tecnológicas

- Temperatura de la aceituna: 2.5-22.8ºC
- Adición de MTN : 0-1 %
- Adición de agua: 0-200l/h
- Ritmo de la pasta: 460-1300 kg/h
- Temperatura de la pasta: 9-36.7ºC
- Tiempo de batido: 35-175min

Variables mecánicas

- Diámetro de criba del molino de martillos: 4-7mm
- Velocidad de rotación del molino: 2000-3000 rpm
- Punto de salida del aceite en el decanter: 98-101mm

Espectros de la masa de aceituna



Outputs para crear la RNA

- Contenido graso del orujo: 1.5-6%
- Humedad del orujo: 51-78%

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Los resultados obtenidos mostraron una alta correlación linear entre los valores obtenidos en el laboratorio y los obtenidos por la RNA con valores de r = 0.9012 y r = 0.8997 y con errores de predicción (RMSE) 0.0327 y 1.5687 para el contenido graso del orujo y la humedad del mismo respectivamente. Las figuras muestran un alto coeficiente de determinación cercano a 1 entre los valores reales y los predichos tanto para el contenido graso como para la humedad del orujo a la salida del decanter.

CONCLUSIONES

Con estos resultados, la principal conclusión de este trabajo de investigación fue la capacidad predictiva que las RNAs tienen para conocer en tiempo real parámetros que influyen en las diferentes operaciones del proceso de elaboración y en concreto, en el decanter pudiendo así, ser una gran herramienta para regular el funcionamiento del mismo evitando las pérdidas del aceite al orujo sin influir en las características del aceite obtenido.

REFERENCES:
- Jiménez, A., Aguilera, M.P., Uceda, M., Beltrán, G., Neural network as tool for virgin olive oil elaboration process optimization. *J. Food Eng.*, 2009, 95, 135–141.
- Jiménez, A., Beltrán, G., Aguilera, M.P., Uceda, M., A sensor-software based on artificial neural network for the optimization of the olive oil elaboration process. *Sensor Actuator*, 2008, 129, 985–990.
- Furferi, R., Carfagni, M., Daou, M., Artificial neural network software for real time estimation of olive oil qualitative parameters during continuous extraction. *Comput. Electron. Agr.*, 2007, 55 (2), 115–131.

JUNTA DE ANDALUCIA

Instituto de Investigación y Formación Agraria y Pesquera
CONSEJERÍA DE AGRICULTURA, PESCA Y MEDIO AMBIENTE

Unión Europea

Congreso internacional

Expoliva 2017 (1)

Un modelo RNA predictivo como simulador del proceso AOVE

Estrella Funes[1], Yosra Allouche[1], Gabriel Beltrán[1], M. Paz Aguilera[2], Antonio Jiménez[1].
[1]IFAPA "Venta del Llano" Ctra. Bailen- Motril, km 18,4. 23620. Mengíbar (Jaén)
[2] Citoliva, Parque Tecnológico Científico Geolit. C/Sierra Morena, Planta Baja. Edif. CTSA, mod. 1 23620, Mengíbar, (Jaén).
Email: estrellafulo84@gmail.com

INTRODUCCIÓN

El proceso industrial de elaboración de aceite de oliva virgen extra (AOVE) muestra un elevado grado de complejidad debido a la naturaleza cambiante de la aceituna, lo que requiere de una constante regulación de las condiciones del proceso. Para un control eficiente del proceso es necesario disponer de una herramienta que permita conocer con antelación el comportamiento de la pasta de aceituna a lo largo del proceso de extracción, de tal manera que se puedan adaptar las diferentes variables del proceso a las características de la materia prima en función de los objetivos esperados. Esto se consigue con la combinación del sistema SCADA, la tecnología NIR (Diodo Array, AOTF) basada en dispositivos ópticos que permiten el escaneado de manera instantánea y continuada de la masa de aceituna, orujo o aceite de oliva adaptándose al proceso productivo, junto con las redes neuronales artificiales como novedosas técnicas no-lineales pueden constituir una herramienta viable debido a su capacidad de clasificar y predecir. Ya sea de forma individual los sistemas NIR y las RNA se han incorporado en diferentes aplicaciones relacionadas con el AOVE (Torrecilla et al., 2013; Faria et al., 2015; Furferi et al., 2010, 2008, 2007, Jiménez et al., 2008; Jiménez Márquez et al., 2009) o en combinación (RNAs y AOTF-NIR) para predecir 'on-line' la extractabilidad y las características potenciales del fruto a través de la masa de aceituna (Allouche et al., 2015).

OBJETIVO

Crear modelos neuronales basados en RNAs que predigan las características del orujo y del AOVE, a partir de los espectros de la pasta de aceituna proporcionada por AOTF-NIR, teniendo en cuenta las condiciones del proceso. A partir de las predicciones aportadas se puede actuar sobre las diferentes variables que interfieren en el mismo bajo los objetivos de la obtención de AOVE de extrema calidad con las mínimas pérdidas de grasa en los orujos optimizando el funcionamiento global del proceso de elaboración.

MATERIALES Y MÉTODOS

Este trabajo se ha llevado a cabo con un sistema continuo de dos fases instalado en el IFAPA "Venta del Llano" usando aceitunas de la variedad Picual. Los ensayos, modificando las diferentes variables del proceso (Tab. 1) fueron realizados por triplicado durante cinco campañas agrícolas consecutivas.

Tabla 1. Variables tecnológicas y mecánicas del proceso

Fase del proceso	Parámetros	Abrev	R. valores (Min-max)[1]
Acondiciona-miento de la pasta	Temperatura de la aceituna (°C)	To	2.5-19.1
	Grado de molienda (mm)	Sd	4-7
	Revoluciones de molino (rpm)	Rv	2000-3000
	Temperatura de la pasta (°C)	Tm	9-36.7
	Tiempo de batido (minutos)	tm	35-175
	Adición de MTN (%)	MTN	0-1
Centrifugación y extracción	Adición de agua de dilución de masa (L/h)	Fw	0-200
	Caudal de alimentación al DCH (kg/h)	Fp	460-1300
	Punto de descarga de la masa en el DCH (mm)	L	0-27.5
	Posición punto de descarga del aceite del DCH (mm)	R_i	98-101
Clarificación del AOVE en CV	Temperatura del aceite a CV (°C)	Toi	13-3.5
	Temperatura del agua a CV (°C)	Twi	9.2-34
	Caudal del aceite a CV (L/h)	Foi	58.5-511.9
	Caudal del agua a CV (L/h)	Fwi	0-655.5

Para la extractabilidad se recogieron espectros mediante un equipo de infrarrojo cercano AOTF-NIR) que posteriormente fueron pre tratados con el sistema wavelet y muestras de orujo por triplicado a la salida del decanter y analizadas conforme a lo que la normativa vigente de los parámetros reflejados en la Tabla 2. Para la caracterización del AOVE se recogieron a la salida de la CV espectros del aceite y las muestras correspondientes cuyos parámetros analizados según normativa son reflejados en la Tabla 2.

Tabla 2. Datos analíticos del proceso

Objetivos (Productos)	Parámetros	Datos entrenamiento		Datos Validación	
		Rango (min-max)	SD	Rango (min-max)	SD
Extractabilidad (Orujo)	Cont. graso (%)	1.66-5.89	0.72	2.15-5.92	0.7
	Cont. en humedad (%)	51.57-63.47	3.52	56.98-75.42	3.48
Características AOVE	Acidez (% of ácido oléico)	0.10-2.56	0.44	0.11-2.57	0.45
	I. Peróxidos ($mEqO_2/kg$)	1.37-18.25	3.08	1.48-18.96	3.14
	K_{232}	1.29-2.70	0.19	1.09-2.64	0.20
	K_{270}	0.07-0.22	0.027	0.07-0.2	0.026
	Polifenoles T. (mg/kg)	80-502	89.82	80-502	90.04
	Carotenos (mg/kg)	2.8-11.7	1.91	2.7-11.6	1.27
	Clorofilas(mg/kg)	0.8-15.6	2.97	0.9-15.2	2.95

Las RNAs creadas se basaron en el algoritmo 'feed-forward back-propagation' con un entrenamiento supervisado de gradientes descendientes usando el software Matlab con diferentes inputs y outputs.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

- Para la extractabilidad del proceso del AOVE, las dos redes diseñadas tienen un vector entrada conformado por las variables especificadas en la Tab.1 que caracterizan el proceso de acondicionamiento de la pasta y al de extracción centrífuga, junto a la información espectral NIR de la masa entrante el proceso. Cada red posee un único vector de salida para el contenido graso en húmedo y para el contenido en humedad (Tab. 2). En la Tab. 3 se observa los dos mejores modelos neuronales obtenidos para este objetivo con correlaciones entre los valores predichos y los datos reales de los métodos de referencia altamente significativa (r≥0,90) y con errores de predicción (RMSEP) similares a los encontrados mediante otras técnicas analíticas que miden directamente sobre el subproducto como(García-Sánchez et al., 2005) y Jiménez et al. (08) quienes combinan las RNA´s con NIR.

- Para la caracterización del AOVE, las redes diseñadas contempla todas las etapas de dicho proceso, conteniendo el vector de entrada a la red todas las variables del proceso(Tab.1), junto a los datos espectrales NIR de la pasta de aceituna. Los vectores únicos de salida se aprecian en la Tab.2. Las topologías óptimas de estas siete redes se observa en la Tabla 3. Los modelos predictivos desarrollados consiguieron buenas correlaciones con valores r: 0.72-0.98, siendo los más bajos los coeficientes de absorción UV. Los demás parámetros estuvieron todos por encima de 0.94 con errores de predicción bajos. El indicador de calidad RER, con valores superiores al óptimo 10(Williams and Sobering, 1996, 1993) confirma la buena capacidad predictiva de las redes. En otros trabajos, se pudo comprobar la versatilidad de los sistemas NIR en el análisis on-line del aceite de oliva para la construcción de modelos PLS para la determinación de la acidez y otros parámetros como los pigmentos (Jiménez et al., 2005; Jiménez Márquez, 2003) aportando buenos resultados de validación. Así como se estimó en tiempo real la acidez y peróxidos de AOVE con ARN´s con altos errores de predicción y errores medios por debajo del 6% para la acidez y 5% para los peróxidos (Furferi et al., 2010, 2008, 2007). En trabajos previos se pudo comprobar la robustez de las RNA para predecir las características potenciales del AOVE, a partir de la información espectral del fruto entrante (Allouche et al., 2015), aunque para ello el aceite a caracterizar fue obtenido por el sistema Abencor a escala de laboratorio.

Tabla 3. Topologías óptimas de las RNA obtenidas para el orujo y características AOVE.

		RNA Entrenamiento				RNA Validación			
Parámetros	NT/NV[1]	Capas-Neuronas	F. Transfer capas	F. Entren.	Iters.	r	RMSEP	RPD	RER
Orujo									
Contenido graso (%)	462/231	57/5/1	Tsg/Tsg/PLn	Trp	185	0.90	0.31	2.42	12.16
Contenido humedad (%)	462/231	83/16/1	Tsg/Tsg/ Tsg	Trp	185	0.90	1.56	2.23	11.84
AOVE									
Acidez (% of ácido oléico)	86/43	40/14/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	250	0.98	0.09	5.06	27.73
I. Peróxidos ($mEqO_2/kg$)	86/43	69/14/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	50	0.94	1.09	2.88	16.03
K_{232}	86/43	29/14/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	50	0.84	0.11	1.84	14.42
K_{270}	86/43	59/15/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	50	0.72	0.02	1.44	7.22
Polifenoles T.(mg/kg)	86/43	70/7/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	100	0.96	26.5	3.40	15.91
Carotenos (mg/kg)	86/43	49/25/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	100	0.97	0.49	2.56	18.01
Clorofilas (mg/kg)	86/43	70/35/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	75	0.96	0.82	3.60	17.43

[1]NT: número de datos de entrenamiento NV: número de datos de validación; Tsg: función de transferencia tan-sigmoidal; PLn: función de transferencia linear; Lsg: función de transferencia log-sigmoidal; Trp: función de entrenamiento Resilient Backpropagation

CONCLUSIONES

Datos históricos del proceso y características espectrales NIR, del producto entrante al proceso, han permitido modelar éste mediante el empleo de RNA´s. Estas RNA´s actúan como algoritmos predictivos de propiedades de los aceites y subproductos obtenidos, a partir de la información de las características del fruto y de las condiciones de trabajo establecido mediante las variables del proceso. El conjunto de modelos RNA´s desarrollados permite definir una herramienta tipo 'simulador' global del proceso AOVE. Este simulador puede realizar una optimización predictiva del proceso, a partir de una base de datos espectrales NIR o mediante escaneado en tiempo real, ajustando aquellas variables que permitan conseguir ciertos objetivos como el disminuir las pérdidas de aceite, de obtener aceites con determinadas características, etc.

REFERENCES:
- Allouche, Y., Funes López, E., Maza, G.B., Márquez, A.J., 2015. Near infrared spectroscopy and artificial neural network to characterise olive fruit and oil online for process optimisation. J. Near Infrared Spectrosc. 23, 111–12:
- Faria, S., Rodrigues, C.A., Nunes, R., dos Santos, R.M., 2015. Evaluation of extra virgin olive oil stability by artificial neural network. Food Chem. 179, 35–43
- Furferi, R., Carfagni, M., Daou, M., 2008. Real time estimation of peroxides and acidity level of extra virgin olive oil: an integrated approach. Int. J. Math. Comput. Simul. 2
- Furferi, R., Carfagni, M., Daou, M., 2007. Artificial neural network software for real-time estimation of olive oil qualitative parameters during continuous extraction. Comput. Electron. Agric. 55, 115–131.
- ISO 662:2016, 2016. Animal and vegetable fats and oils. Determination of moisture and volatile matter content; ISO 9936:2016, 2016. Animal and vegetable fats and oils. Determination of tocopherols and tocotrienols contents by High-performance liquid chromatography.
- Jiménez, A., Beltrán, G., Aguilera, M.P., Uceda, M., 2008. A sensor software based on artificial neural network for the optimization of olive oil elaboration process. Sensors Actuators, B Chem.
- Jiménez, A., Molina, A., Pascual, M.I., 2005. Using optical NIR sensor for on-line virgin olive oils characterization. Sensors Actuators, B Chem. 107, 64–68.
- Jiménez Marquez, A., 2003. Monitoring carotenoid and chlorophyll pigments in virgin olive oil by visible near infrared transmitance spectroscopy. On-line application. J. Near Infrared Spectrosc. 11, 219–226.
- Jiménez Marquez, A., Aguilera Herrera, M.P., Uceda Ojeda, M., Beltrán Maza, G., 2009. Neural network as tool for virgin olive oil elaboration process optimization. J. Food Eng.
- Mínguez Mosquera, M.I., Gandul-Rojas, B., Montaño Asquerino, A. Garrido-Fernández, J., 1991. Determination of chlorophylls and carotenoids by high-performance liquid chromatography during olive lactic fermentation. J. Chromatogr. 585, 259–266.
- Official Journal European Union, 2014. Commission Implementing Regulation (EU) No. 1348/2013 amending Regulation (CC) No 2568/91 on the characteristics of olive oil and olive residue oil and on the relevant methods of analysis.
- Torrecilla, J.S., Cancilla, J.C., Matute, G., Díaz-Rodríguez, P., 2013. Neural network models to classify olive oils within the protected denomination of origin framework. Int. J. Food Sci. Technol. 48, 2258–2534.
- Torrecilla, J.S., Mena, M.L., Yáñez-Sedeño, P., García, J., 2008. Field determination of phenolic compounds in olive oil mill wastewater by artificial neural network. Biochem. Eng. J. 38, 171–175.
- Vázquez Roncero A., Janer del Valle C., Janer del Valle M.L., 1973. Determinación de los polifenoles totales del aceite de oliva. Grasas y Aceites 24, 350.
- Williams, P.C., Sobering, D.C., 1996. How do we do it: a brief summary of the methods we use in developing near infrared calibrations., in: Davies, A.M.C., Williams, P.C. (Eds.), Near Infrared Spectroscopy: The Future Waves. NIR Publications, Chichester, UK, pp.
- Williams, P.C., Sobering, D.C., 1993. Comparison of commercial Near Infrared Transmittance and Reflectance instruments for analysis of whole grains and seeds. J. Near Infrared Spectrosc. 1, 25-32.

Instituto de Investigación y Formación Agraria y Pesquera
CONSEJERÍA DE AGRICULTURA, PESCA Y MEDIO AMBIENTE
JUNTA DE ANDALUCIA
Unión Europea

expoliva
xviii simposium científico-técnico
xviii scientific-technical symposium

e:2017
10-12 may
spain-andalusia
jaen
www.expoliva.com

José Carlos Marzal Fernández, en calidad de Director Gerente de la Fundación para la Promoción y el Desarrollo del Olivar y del Aceite de Oliva, con CIF G-23228398 y domicilio en el Parque Científico-Tecnológico Geolit, Edif. Terra Oleum, calle Sierra Morena, 13A, de Mengíbar (Jaén, España),

CERTIFICA

Que **ESTRELLA FUNES LÓPEZ** ha presentado la comunicación titulada ***Un modelo RNA predictivo como simulador del proceso AOVE*** al XVIII Simposio Científico-Técnico de EXPOLIVA 2017, Feria Internacional del Aceite de Oliva e Industrias Afines, celebrado durante los días 10 al 12 de mayo de 2017, habiendo sido aceptada por el Comité Científico del Simposio en el FORO DE LA INDUSTRIA, TECNOLOGÍA Y CALIDAD OLEÍCOLA.

Que dicha comunicación ha sido editada en formato digital en la publicación titulada ***Comunicaciones presentadas al XVIII Simposio Científico-Técnico de Expoliva 2017***, con ISBN 978-84-946839-1-6.

Y para que conste y surta los efectos oportunos, firmo el presente certificado a quince de mayo de dos mil diecisiete.

FUNDACIÓN PARA EL DESARROLLO Y PROMOCIÓN DEL OLIVAR Y EL ACEITE DE OLIVA – EXPOLIVA

José Carlos Marzal
Director Gerente

www.expoliva.com
simposium@expoliva.com

Fundación del Olivar

Congreso internacional

Expoliva 2017 (2)

Un modelo RNA predictivo como simulador del proceso AOVE

Estrella Funes[1], Yosra Allouche[1], Gabriel Beltrán[1], M. Paz Aguilera[2], Antonio Jiménez[1].
[1]IFAPA "Venta del Llano" Ctra. Bailen- Motril, km 18,4. 23620. Mengíbar (Jaén)
[2] Citoliva, Parque Tecnológico Científico Geolit. C/Sierra Morena, Planta Baja. Edif. CTSA, mod. 1 23620, Mengíbar, (Jaén).
Email: estrellafulo84@gmail.com

INTRODUCCIÓN

El proceso industrial de elaboración de aceite de oliva virgen extra (AOVE) muestra un elevado grado de complejidad debido a la naturaleza cambiante de la aceituna, lo que requiere de una constante regulación de las condiciones del proceso. Para un control eficiente del proceso es necesario disponer de una herramienta que permita conocer con antelación el comportamiento de la pasta de aceituna a lo largo del proceso de extracción, de tal manera que se puedan adaptar las diferentes variables del proceso a las características de la materia prima en función de los objetivos esperados. Esto se consigue con la combinación del sistema SCADA, la tecnología NIR (Diodo Array, AOTF) basada en dispositivos ópticos que permiten el escaneado de manera instantánea y continuada de la masa de aceituna, orujo o aceite de oliva adaptándose al proceso productivo, junto con las redes neuronales artificiales como novedosas técnicas no-lineales pueden constituir una herramienta viable debido a su capacidad de clasificar y predecir. Ya sea de forma individual los sistemas NIR y las RNA se han incorporado en diferentes aplicaciones relacionadas con el AOVE (Torrecilla et al., 2013; Faria et al., 2015; Furferi et al., 2010, 2008, 2007, Jiménez et al., 2008; Jiménez Márquez et al., 2009) o en combinación (RNAs y AOTF-NIR) para predecir 'on-line' la extractabilidad y las características potenciales del fruto a través de la masa de aceituna (Allouche et al., 2015).

OBJETIVO

Crear modelos neuronales basados en RNAs que predigan las características del orujo y del AOVE, a partir de los espectros de la pasta de aceituna proporcionada por AOTF-NIR, teniendo en cuenta las condiciones del proceso. A partir de las predicciones aportadas se puede actuar sobre las diferentes variables que interfieren en el mismo bajo los objetivos de la obtención de AOVE de extrema calidad con las mínimas pérdidas de grasa en los orujos optimizando el funcionamiento global del proceso de elaboración.

MATERIALES Y MÉTODOS

Este trabajo se ha llevado a cabo con un sistema continuo de dos fases instalado en el IFAPA "Venta del Llano" usando aceitunas de la variedad Picual. Los ensayos, modificando las diferentes variables del proceso (Tab. 1) fueron realizados por triplicado durante cinco campañas agrícolas consecutivas.

Tabla 1. Variables tecnológicas y mecánicas del proceso

Fase del proceso	Parámetros	Abrev	R. valores (Min-max)[1]
Acondiciona-miento de la pasta	Temperatura de la aceituna (°C)	To	2.5-19.1
	Grado de molienda (mm)	Sd	4-7
	Revoluciones de molino (rpm)	Rv	2000-3000
	Temperatura de la pasta (°C)	Tm	9-36.7
	Tiempo de batido (minutos)	tm	35-175
	Adición de MTN (%)	MTN	0-1
Centrifugación y extracción	Adición de agua de dilución de masa (L/h)	Fw	0-200
	Caudal de alimentación al DCH (kg/h)	Fp	460-1300
	Punto de descarga de la masa en el DCH (mm)	L	0-27.5
	Posición punto de descarga del aceite del DCH (mm)	R_t	98-101
Clarificación del AOVE en CV	Temperatura del aceite a CV (°C)	Toi	13-3.5
	Temperatura del agua a CV (°C)	Twi	9.2-34
	Caudal del aceite a CV (L/h)	Foi	58.5-511.9
	Caudal del agua a CV (L/h)	Fwi	0-655.5

Para la extractabilidad se recogieron espectros mediante un equipo de infrarrojo cercano AOTF-NIR) que posteriormente fueron pre tratados con el sistema wavelet y muestras de orujo por triplicado a la salida del decanter y analizadas conforme a lo que la normativa vigente de los parámetros reflejados en la Tabla 2. Para la caracterización del AOVE se recogieron a la salida de la CV espectros del aceite y las muestras correspondientes cuyos parámetros analizados según normativa son reflejados en la Tabla 2.

Tabla 2. Datos analíticos del proceso

Objetivos (Productos)	Parámetros	Datos entrenamiento		Datos Validación	
		Rango (min-max)	SD	Rango (min-max)	SD
Extractabilidad (Orujo)	Cont. graso (%)	1.66-5.89	0.72	2.15-5.92	0.7
	Cont. en humedad (%)	51.57-63.47	3.52	56.98-75.42	3.48
Características AOVE	Acidez (% of ácido oléico)	0.10-2.56	0.44	0.11-2.57	0.45
	I. Peróxidos (mEqO$_2$/kg)	1.37-18.25	3.08	1.48-18.96	3.14
	K_{232}	1.29-2.70	0.19	1.09-2.64	0.20
	K_{270}	0.07-0.22	0.027	0.07-0.2	0.026
	Polifenoles T. (mg/kg)	80-502	89.82	80-502	90.04
	Carotenos (mg/kg)	2.8-11.7	1.91	2.7-11.6	1.27
	Clorofilas(mg/kg)	0.8-15.6	2.97	0.9-15.2	2.95

Las RNAs creadas se basaron en el algoritmo 'feed-forward back-propagation' con un entrenamiento supervisado de gradientes descendientes usando el software Matlab con diferentes inputs y outputs.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

- Para la extractabilidad del proceso del AOVE, las dos redes diseñadas tienen un vector entrada conformado por las variables especificadas en la Tab.1 que caracterizan el proceso de acondicionamiento de la pasta y al de extracción centrífuga, junto a la información espectral NIR de la masa entrante el proceso. Cada red posee un único vector de salida para el contenido graso en húmedo y para el contenido en humedad (Tab. 2). En la Tab. 3 se observa los dos mejores modelos neuronales obtenidos para este objetivo con correlaciones entre los valores predichos y los datos reales de los métodos de referencia altamente significativa (r≥0,90) y con errores de predicción (RMSEP) similares a los encontrados mediante otras técnicas analíticas que miden directamente sobre el subproducto como(García-Sánchez et al., 2005) y Jiménez et al. (08) quienes combinan las RNA´s con NIR.

- Para la caracterización del AOVE, las redes diseñadas contempla todas las etapas de dicho proceso, conteniendo el vector de entrada a la red todas las variables del proceso(Tab.1), junto a los datos espectrales NIR de la pasta de aceituna. Los vectores únicos de salida se aprecian en la Tab.2. Las topologías óptimas de estas siete redes se observa en la Tabla 3. Los modelos predictivos desarrollados consiguieron buenas correlaciones con valores r: 0.72-0.98, siendo los más bajos los coeficientes de absorción UV. Los demás parámetros estuvieron todos por encima de 0.94 con errores de predicción bajos. El indicador de calidad RER, con valores superiores al óptimo 10(Williams and Sobering, 1996, 1993) confirma la buena capacidad predictiva de las redes. En otros trabajos, se pudo comprobar la versatilidad de los sistemas NIR en el análisis on-line del aceite de oliva para la construcción de modelos PLS para la determinación de la acidez y otros parámetros como los pigmentos (Jiménez et al., 2005; Jiménez Márquez, 2003) aportando buenos resultados de validación. Así como se estimó en tiempo real la acidez y peróxidos de AOVE con ARN´s con altos errores de predicción y errores medios por debajo del 6% para la acidez y 5% para los peróxidos (Furferi et al., 2010, 2008, 2007). En trabajos previos se pudo comprobar la robustez de las RNA para predecir las características potenciales del AOVE, a partir de la información espectral del fruto entrante (Allouche et al., 2015), aunque para ello el aceite a caracterizar fue obtenido por el sistema Abencor a escala de laboratorio.

Tabla 3. Topologías óptimas de las RNA obtenidas para el orujo y características AOVE.

		RNA Entrenamiento					RNA Validación			
Parámetros	NT/NV[1]	Capas-Neuronas	F. Transfer capas	F. Entren.	Iters.	r	RMSEP	RPD	RER
Orujo										
Contenido graso (%)	462/231	57/5/1	Tsg/Tsg/PLn	Trp	185	0.90	0.31	2.42	12.16
Contenido humedad (%)	462/231	83/16/1	Tsg/Tsg/ Tsg	Trp	185	0.90	1.56	2.23	11.84
AOVE										
Acidez (% of ácido oléico)	86/43	40/14/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	250	0.98	0.09	5.06	27.73
I. Peróxidos (mEqO$_2$/kg)	86/43	69/14/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	50	0.94	1.09	2.88	16.03
K_{232}	86/43	29/14/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	50	0.84	0.11	1.84	14.42
K_{270}	86/43	59/15/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	50	0.72	0.02	1.44	7.22
Polifenoles T.(mg/kg)	86/43	70/7/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	100	0.96	26.5	3.40	15.91
Carotenos (mg/kg)	86/43	49/25/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	100	0.97	0.49	2.56	18.01
Clorofilas (mg/kg)	86/43	70/35/1	Lsg/ Tsg/ Tsg	Trp	75	0.96	0.82	3.60	17.43

1NT: número de datos de entrenamiento NV: número de datos de validación; Tsg: función de transferencia tan-sigmoidal; PLn: función de transferencia linear; Lsg: función de transferencia log-sigmoidal; Trp: función de entrenamiento Resilient Backpropagation

CONCLUSIONES

Datos históricos del proceso y características espectrales NIR, del producto entrante al proceso, han permitido modelar éste mediante el empleo de RNA´s. Estas RNA´s actúan como algoritmos predictivos de propiedades de los aceites y subproductos obtenidos, a partir de la información de las características del fruto y de las condiciones de trabajo establecido mediante las variables del proceso. El conjunto de modelos RNA´s desarrollados permite definir una herramienta tipo 'simulador' global del proceso AOVE. Este simulador puede realizar una optimización predictiva del proceso, a partir de una base de datos espectrales NIR o mediante escaneado en tiempo real, ajustando aquellas variables que permitan conseguir ciertos objetivos como el disminuir las pérdidas de aceite, de obtener aceites con determinadas características, etc.

REFERENCES:
- Allouche, Y., Funes López, E., Maza, G.B., Márquez, A.J., 2015. Near infrared spectroscopy and artificial neural network to characterise olive fruit and oil online for process optimisation. J. Near Infrared Spectrosc. 23, 111–12;
- Faria, S., Rodrigues, C.A., Nunes, R., dos Santos, R.M., 2015. Evaluation of extra-virgin olive oil stability by artificial neural network. Food Chem. 179, 35–43
- Furferi, R., Carfagni, M., Daou, M., 2008. Real-time-estimation of peroxides and acidity level of extra-virgin olive oil: an integrated approach. Int. J. Math. Comput. Simul. 2
- Furferi, R., Carfagni, M., Daou, M., 2007. Artificial neural network software for real-time-estimation of olive oil qualitative parameters during continuous extraction. Comput. Electron. Agric. 55, 115–131.
- ISO 662:2016, 2016. Animal and vegetable fats and oils. Determination of moisture and volatile matter content; ISO 9936:2016, 2016. Animal and vegetable fats and oils. Determination of tocopherols and tocotrienols contents by High performance liquid chromatography.
- Jiménez, A., Beltrán, G., Aguilera, M.P., Uceda, M., 2008. A sensor software based on artificial neural network for the optimization of olive oil elaboration process. Sensors Actuators, B Chem.
- Jiménez, A., Beltrán, G., Aguilera, M.P., Pancorbo, M.I., 2005. Using optical NIR sensor for on-line virgin olive oils characterization. Sensors Actuators, B Chem. 107, 64–68.
- Jiménez Marquez, A., 2003. Monitoring carotenoid and chlorophyll pigments in virgin olive oil by visible-near infrared transmitance spectroscopy. On-line application. J. Near Infrared Spectrosc. 11, 219–226.
- Jiménez Marquez, A., Aguilera Herrera, M.P., Uceda Ojeda, M., Beltrán Maza, G., 2009. Neural network as tool for virgin olive oil elaboration process optimization. J. Food Eng.
- Mínguez Mosquera, M.I., Gandul-Rojas, B., Montaño Asquerino, A., Garrido Fernández, J., 1991. Determination of chlorophylls and carotenoids by high-performance liquid chromatography during olive lactic fermentation. J. Chromatogr. 585, 259–266.
- Official Journal European Union, 2014. Commission Implementing Regulation (EU) No. 1348/2013 amending Regulation (CC) No 2568/91 on the characteristics of olive oil and olive residue oil and on the relevant methods of analysis.
- Torrecilla, J.S., Cancilla, J.C., Matute, G., Díaz-Rodríguez, P., 2013. Neural network models to classify olive oils within the protected denomination of origin framework. Int. J. Food Sci. Technol. 48, 2258–2534.
- Torrecilla, J.S., Mena, M.L., Yáñez Sedeño, P., García, J., 2008. Field determination of phenolic compounds in olive oil mill wastewater by artificial neural network. Biochem. Eng. J. 38, 171–179.
- Vázquez Roncero A., Janer del Valle C., Janer del Valle M.L., 1973. Determinación de los polifenoles totales del aceite de oliva. Grasas y Aceites 24, 350.
- Williams, P.C., Sobering, D.C., 1996. How do we do it: a brief summary of the methods we use in developing near infrared calibrations., in: Davies, A.M.C., Williams, P.C. (Eds.), Near Infrared Spectroscopy: The Future Waves. NIR Publications, Chichester, UK, pp.
- Williams, P.C., Sobering, D.C., 1993. Comparison of commercial Near Infrared Transmittance and Reflectance instruments for analysis of whole grains and seeds. J. Near Infrared Spectrosc. 1, 25–32.

JUNTA DE ANDALUCIA

Instituto de Investigación y Formación Agraria y Pesquera
CONSEJERÍA DE AGRICULTURA, PESCA Y MEDIO AMBIENTE

Unión Europea

expoliva
xviii simposium científico-técnico
xviii scientific-technical symposium

e:2017
10-12 may
spain-andalusia
jaén
www.expoliva.com

José Carlos Marzal Fernández, en calidad de Director Gerente de la Fundación para la Promoción y el Desarrollo del Olivar y del Aceite de Oliva, con CIF G-23228398 y domicilio en el Parque Científico-Tecnológico Geolit, Edif. Terra Oleum, calle Sierra Morena, 13A, de Mengíbar (Jaén, España),

CERTIFICA

Que **ESTRELLA FUNES LÓPEZ** ha presentado la comunicación titulada ***Modelos RNA´s predictivos para la optimización de la clarificación del AOVE mediante centrifuga vertical*** al XVIII Simposio Científico-Técnico de EXPOLIVA 2017, Feria Internacional del Aceite de Oliva e Industrias Afines, celebrado durante los días 10 al 12 de mayo de 2017, habiendo sido aceptada por el Comité Científico del Simposio en el FORO DE LA INDUSTRIA, TECNOLOGÍA Y CALIDAD OLEÍCOLA.

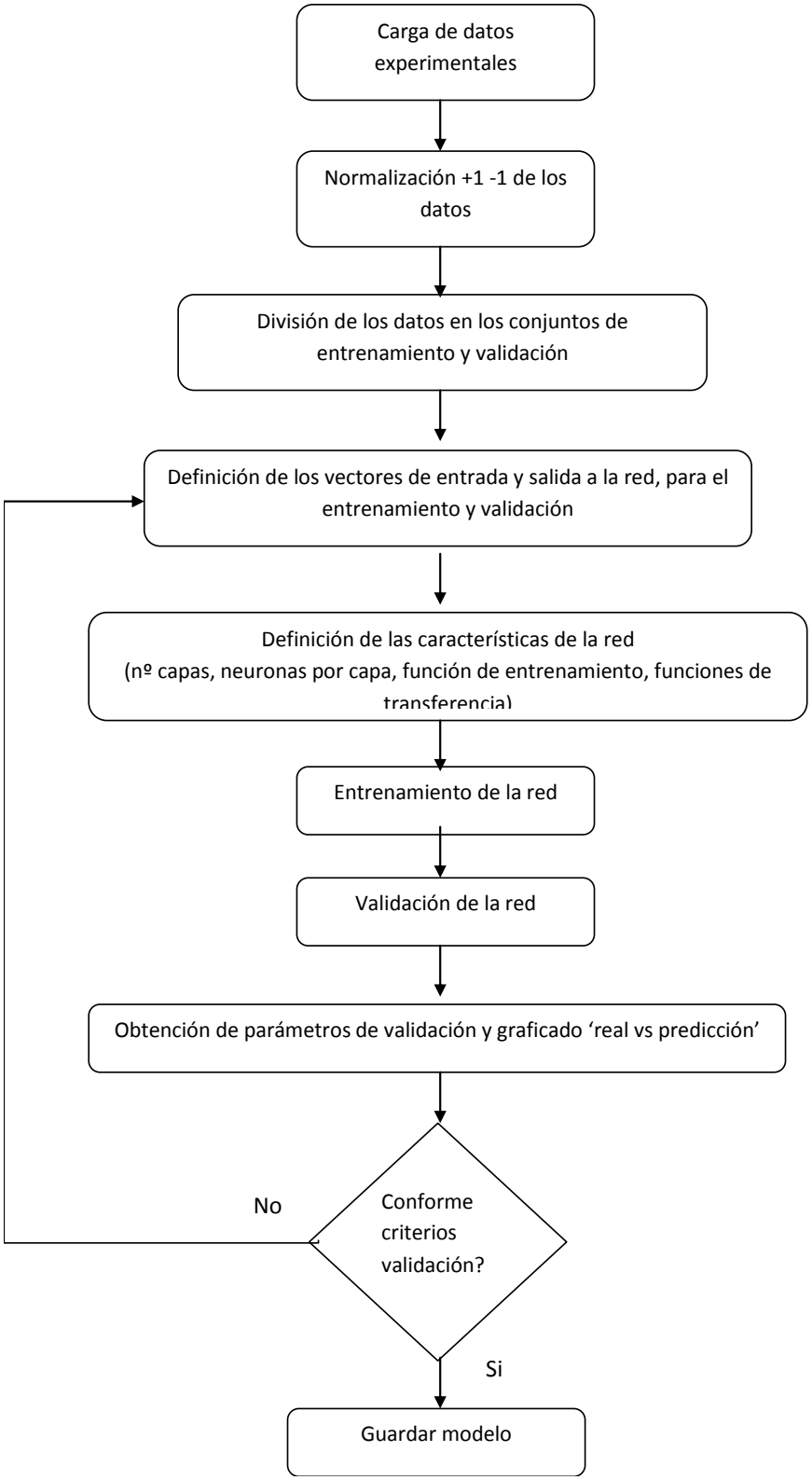
Que dicha comunicación ha sido editada en formato digital en la publicación titulada ***Comunicaciones presentadas al XVIII Simposio Científico-Técnico de Expoliva 2017***, con ISBN 978-84-946839-1-6.

Y para que conste y surta los efectos oportunos, firmo el presente certificado a quince de mayo de dos mil diecisiete.

FUNDACIÓN PARA EL DESARROLLO Y PROMOCIÓN DEL OLIVAR Y EL ACEITE DE OLIVA – EXPOLIVA

José Carlos Marzal
Director Gerente

www.expoliva.com
simposium@expoliva.com

Fundación del Olivar

Procedimiento Matlab