



20° Seminario ARAL SATA, 30 - 31 gennaio 2018, Padenghe sul Garda (BRESCIA)

Utilizzo della strumentazione FT-MIR per la determinazione del profilo acido e per la discriminazione dell'origine geografica del latte ovino

Marco Caredda¹ e Marcella Cabiddu²

¹Servizio per la Ricerca nei Prodotti di Origine Animale, Agris Sardegna, Olmedo (SS);

²ARA, Associazione Regionale Allevatori della Sardegna, Laboratorio Analisi Latte, Nuraxinieddu (OR);

Agris

Agenzia regionale
per la ricerca in agricoltura



REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA



ASSOCIAZIONE REGIONALE ALLEVATORI
DELLA SARDEGNA

Il latte ovino in Sardegna

Importanza economica fondamentale del latte ovino di razza Sarda e dei suoi derivati

- capi bovini 7% (265.561 capi)*
- capi ovini 85% (3.300.185 capi)*
- capi caprini 8% (307.050 capi)*



* ARAS 2017 www.arasardegna.it

Agris

Agencia regionale
per la ricerca in agricoltura



REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA



Il latte ovino in Sardegna

Il latte ovino è quasi interamente utilizzato nella produzione dei formaggi

Formaggi Sardi DOP

- Pecorino Romano DOP
- Fiore Sardo DOP
- Pecorino Sardo DOP



Agris

Agencia regionale
per la ricerca in agricoltura

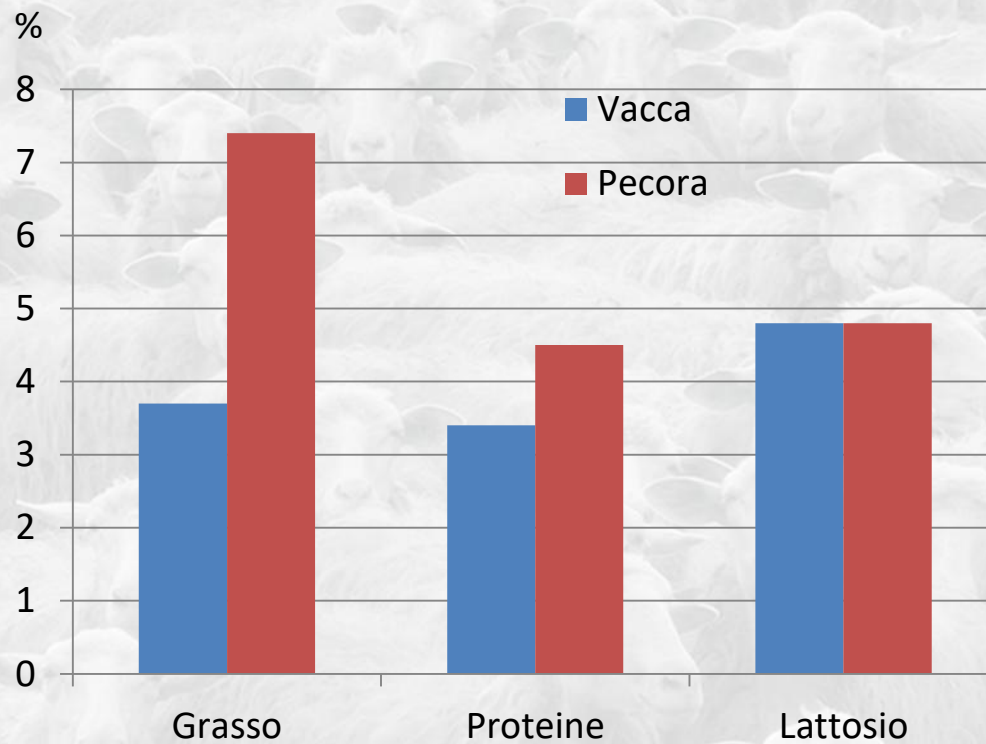


REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA



ASSOCIAZIONE REGIONALE ALLEVATORI
DELLA SARDEGNA

Macro costituenti del latte ovino



Fox P.F., McSweeney P.L.H. (1998). Dairy Chemistry and Biochemistry. Blackie Academic & Professional.

Agris

Agencia regionale
per la ricerca in agricoltura



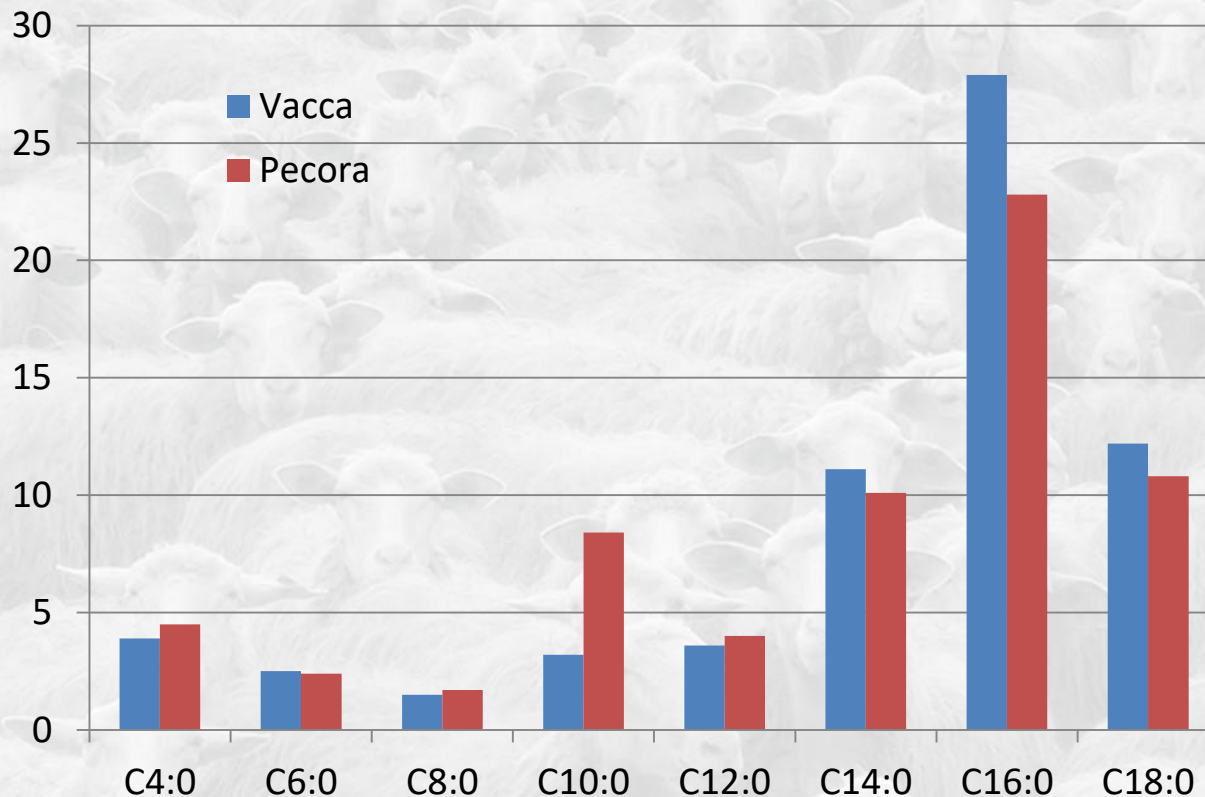
REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA



Costituenti del latte ovino: acidi grassi saturi

% FAME

FAME = Fatty Acid Methyl Esters



Addis M., Cabiddu A., Pinna G., Decandia M., Piredda G., Pirisi A., Molle G. (2005). Milk and Cheese Fatty Acid Composition in Sheep Fed Mediterranean Forages with Reference to Conjugated Linoleic Acid cis-9,trans-11. *Journal of Dairy Science* 88, 3443-3454.

Creamer L.K., MacGibbon A.K.H. (1996). Some recent advances in the basic chemistry of milk proteins and lipids. *International Dairy Journal* 6, 539-568.

Agris

Agencia regionale
per la ricerca in agricoltura

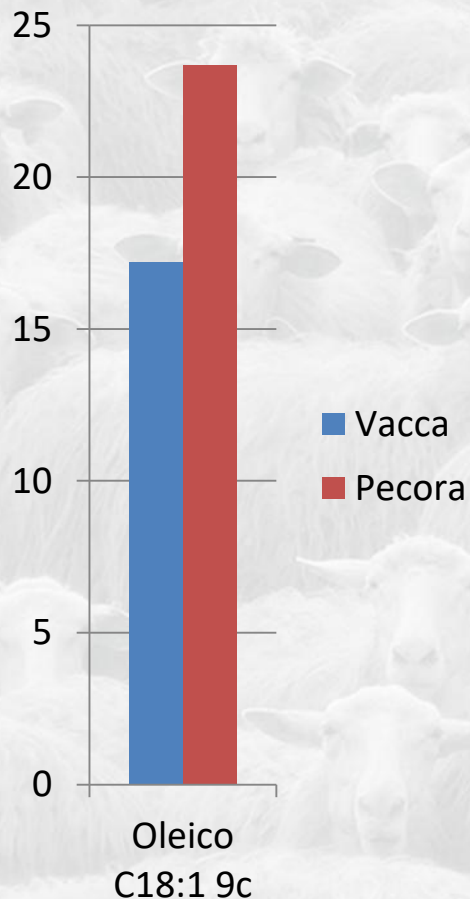


REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA

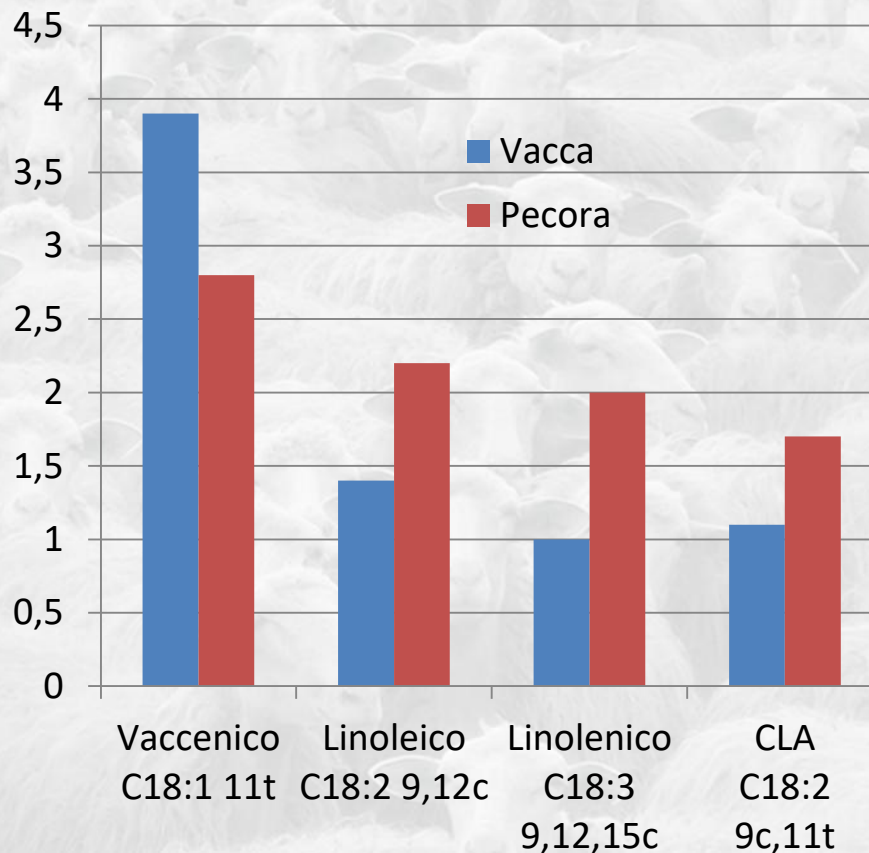


Costituenti del latte ovino: acidi grassi saturi

% FAME



% FAME



FAME = Fatty Acid Methyl Esters

Addis M., Cabiddu A., Pinna G., Decandia M., Piredda G., Pirisi A., Molle G. (2005). Milk and Cheese Fatty Acid Composition in Sheep Fed Mediterranean Forages with Reference to Conjugated Linoleic Acid cis-9,trans-11. *Journal of Dairy Science* 88, 3443-3454.

Creamer L.K., MacGibbon A.K.H. (1996). Some recent advances in the basic chemistry of milk proteins and lipids. *International Dairy Journal* 6, 539-568.

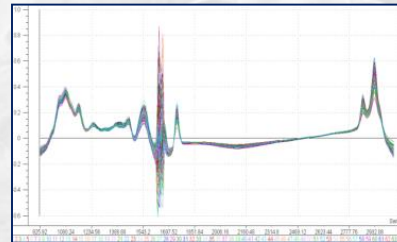
Milkoscan



**Proteine
Grasso
Lattosio
FIL-IDF 141C:2000**



Analisi infrarossa



Pochi secondi



**Proteine
Grasso
Lattosio**

Agris

Agencia regionale
per la ricerca in agricoltura



**REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA**



Costruire modelli per la predizione
degli acidi grassi nel latte ovino

I parte: Analisi infrarossa

Acidi Grassi Saturi

C4:0
C6:0
C8:0
C10:0
C12:0
C14:0
C16:0
C18:0

Acidi Grassi Monoinsaturi

Acido Vaccenico C18:1 11t
Acido Oleico C18:1 9c

Acidi Grassi Polinsaturi

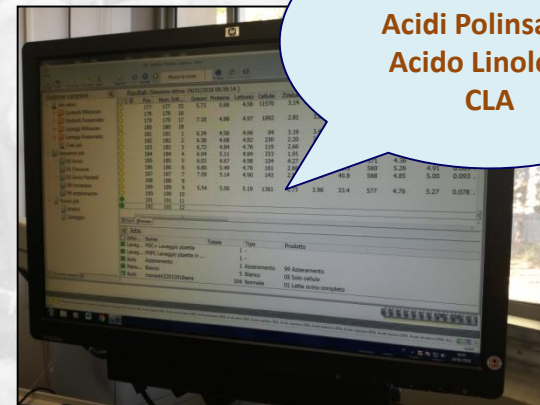
Acido Linoleico C18:2 9,12c
Acido Linolenico C18:3 9,12,15c
CLA, Acido Rumenico C18:2 9c,11t

Categorie

Saturi
Insaturi
Monoinsaturi
Polinsaturi
Omega-6
Omega-3



Pochi secondi



Acidi Saturi
Acidi Polinsaturi
Acido Linoleico
CLA

Agris

Agencia regionale
per la ricerca in agricoltura

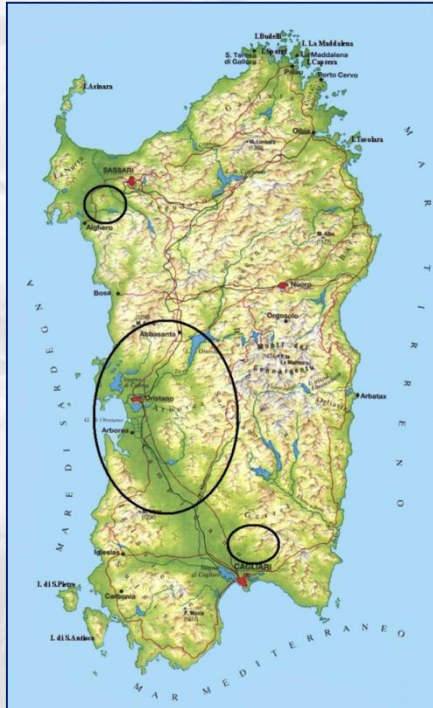


REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA



ASSOCIAZIONE REGIONALE ALLEVATORI
DELLA SARDEGNA

Campionamento

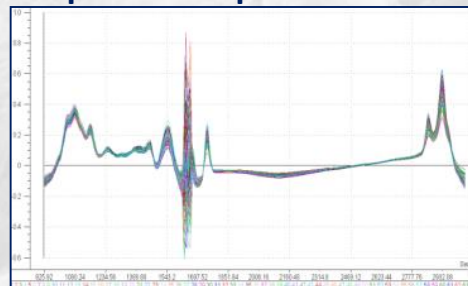


250 campioni di latte ovino
Tre aree geografiche
Tre annate di lattazione 2011-2013

Acquisizione dati di riferimento acidi grassi:
Gascromatografia

Saturi	Polinsaturi	Vaccenico	CLA
2,68	0,25	0,26	0,09
2,76	0,75	0,14	0,06
3,02	0,61	0,21	0,11
3,66	0,52	0,22	0,11
3,98	0,41	0,17	0,06
...

Acquisizione spettri infrarosso



Regressione
PLS

Modello di
predizione per
ogni acido
grasso
(equazione di
regressione)

Agris

Agencia regionale
per la ricerca in agricoltura

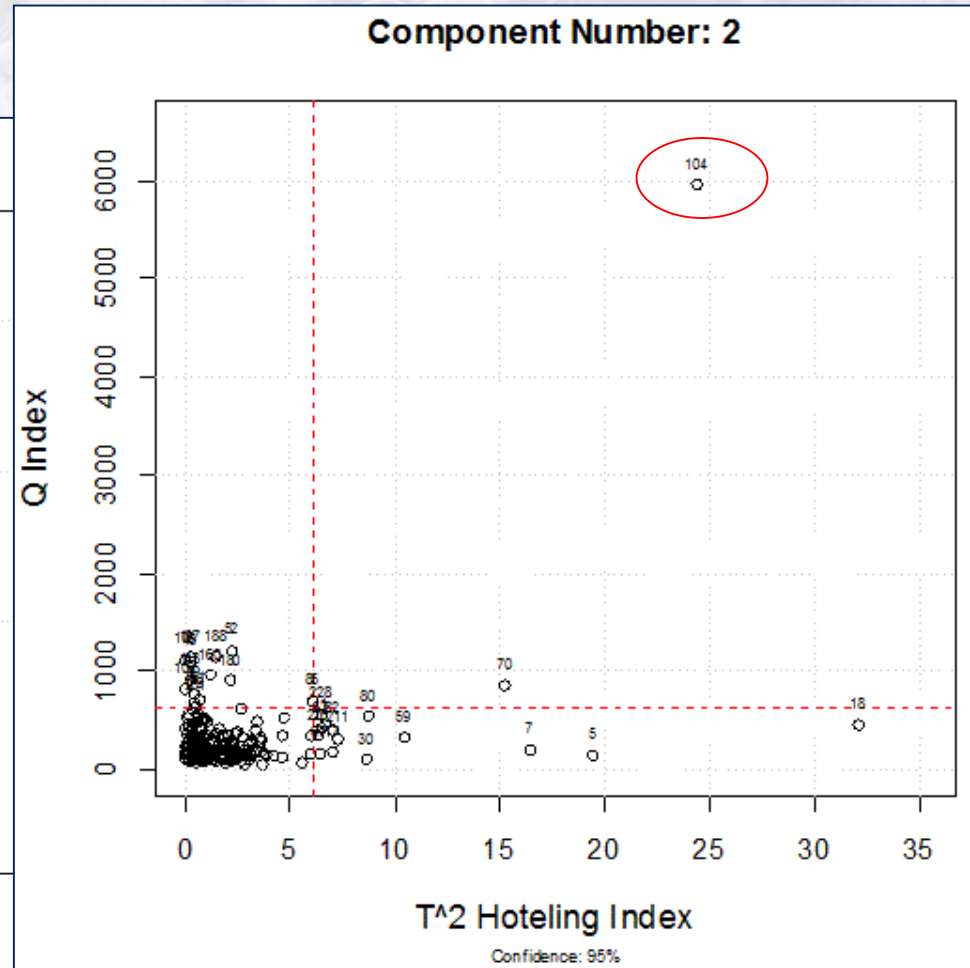
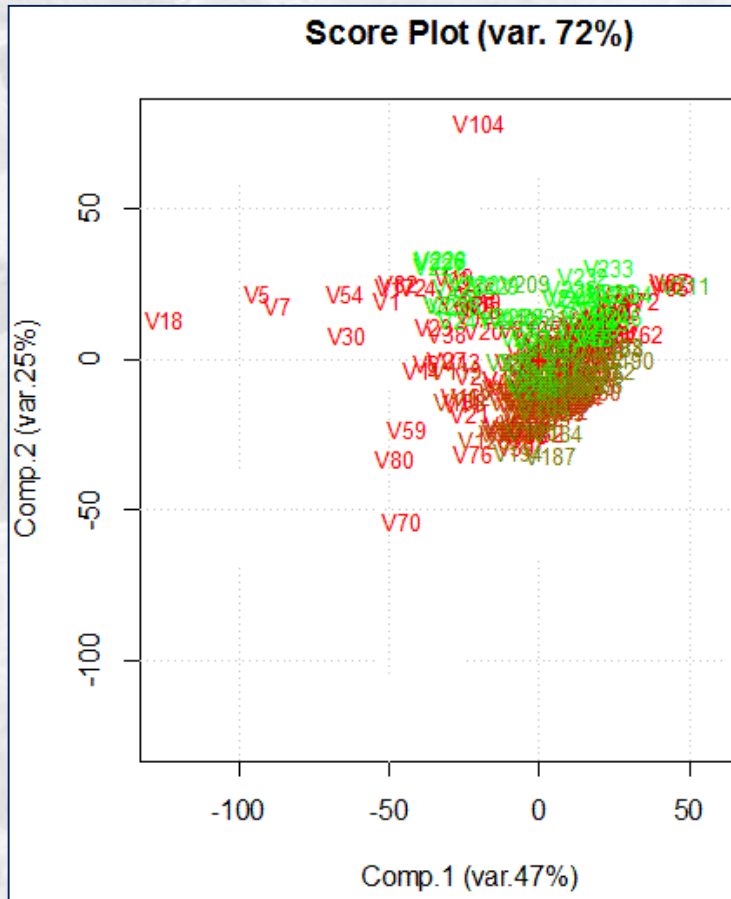


REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA

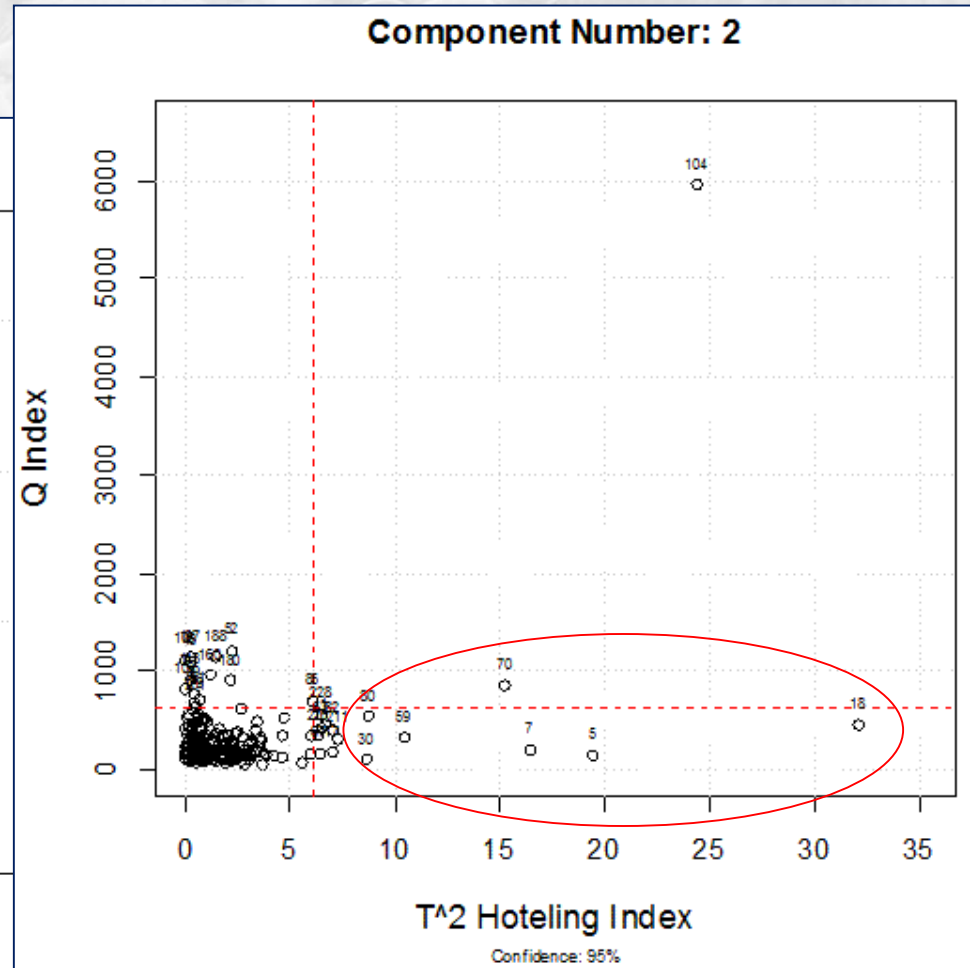
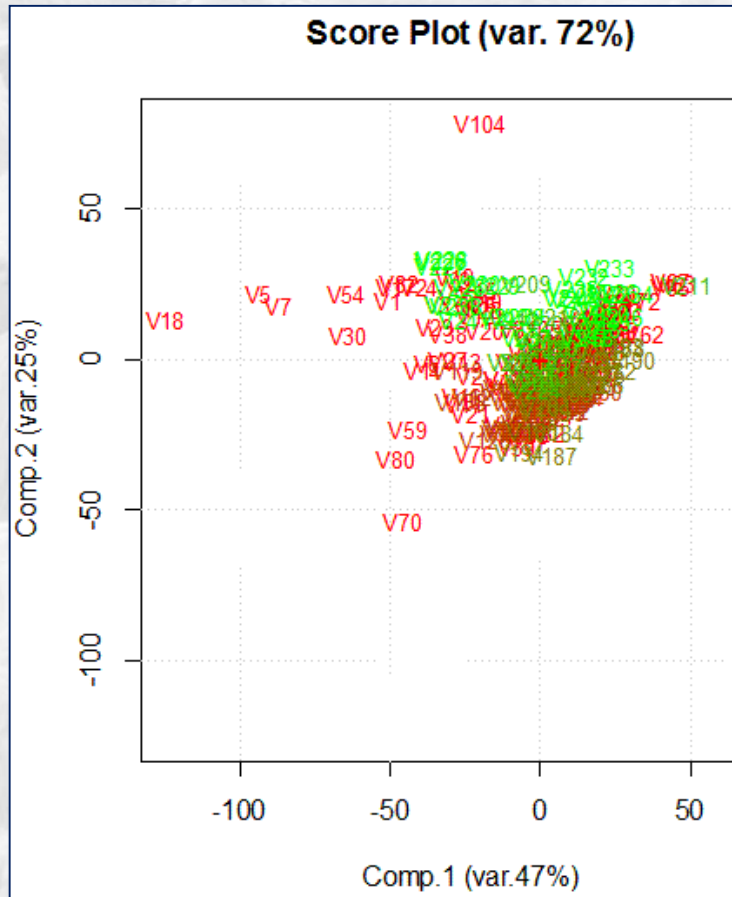


ASSOCIAZIONE REGIONALE ALLEVATORI
DELLA SARDEGNA

PCA del dataset spettrale: outliers



PCA del dataset spettrale: outliers



Influenza elevata sulla costruzione dei modelli

Agris

Agencia regionale
per la ricerca in agricoltura



REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA



Elaborazione dei modelli

Set di calibrazione (145 campioni)



Costruzione dei modelli

data set
242 campioni



Set di validazione (97 campioni)



Validazione dei modelli

Agris

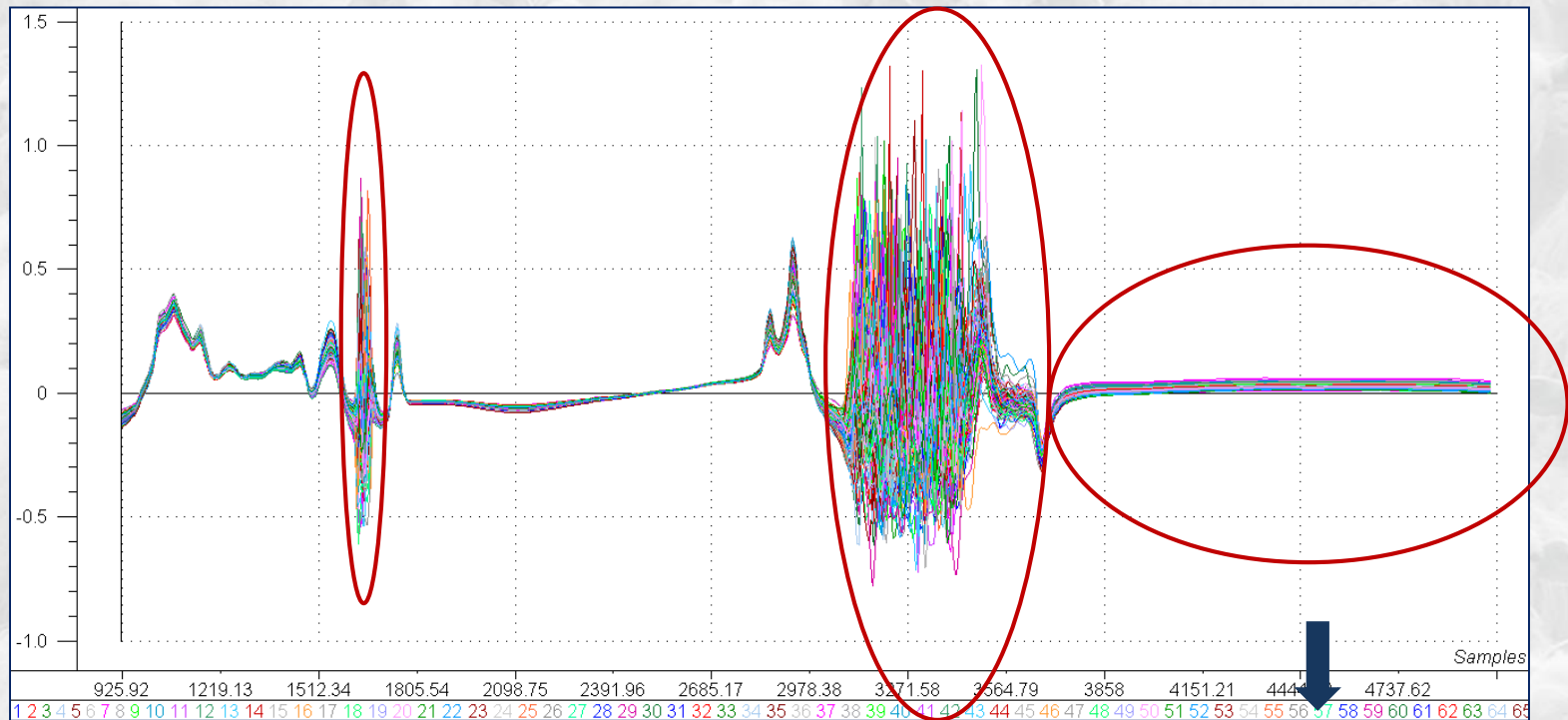
Agencia regionale
per la ricerca in agricoltura



REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA



Riduzione della regione spettrale



Regione rumorosa

Regione rumorosa

Assenza di assorbimenti

Agris

Agencia regionale
per la ricerca in agricoltura

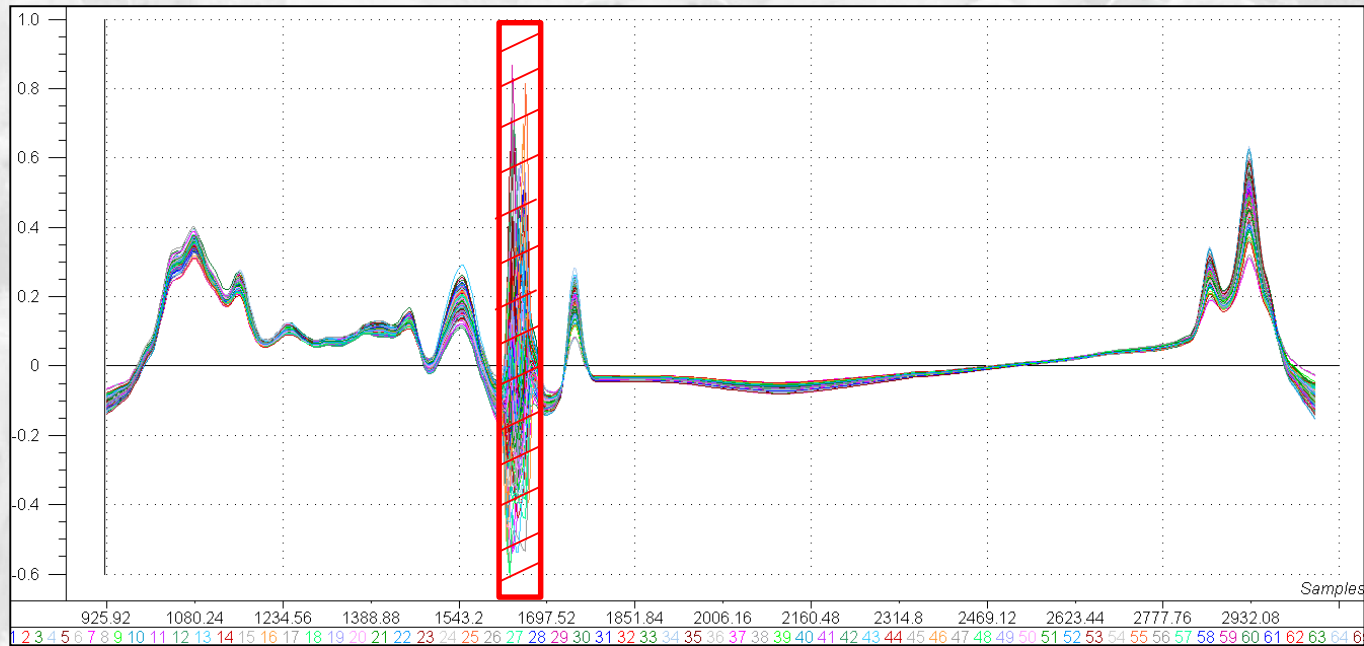


REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA



ASSOCIAZIONE REGIONALE ALLEVATORI
DELLA SARDEGNA

Riduzione della regione spettrale



**Lo spettro è tutto informativo?
È necessario mantenere tutte le lunghezze d'onda?**

**Gli assorbimenti sono dovuti ai diversi costituenti del latte.
Ogni picco è dovuto a diverse molecole contenute nel latte.**

Agris

Agencia regionale
per la ricerca in agricoltura



REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA



Selezione regioni spettrali: Algoritmi Genetici

**La Computazione Evolutiva
è basata su meccanismi di evoluzione e selezione naturale
per trovare la migliore soluzione tra diverse soluzioni**

- In biologia una soluzione è un organismo che si adatta all'ambiente e che è capace di sopravvivere e riprodursi.
- Negli algoritmi genetici una soluzione è una combinazione di variabili.

**Gli Algoritmi Genetici studiano numerose combinazioni di variabili,
ognuna rappresentata da un cromosoma**

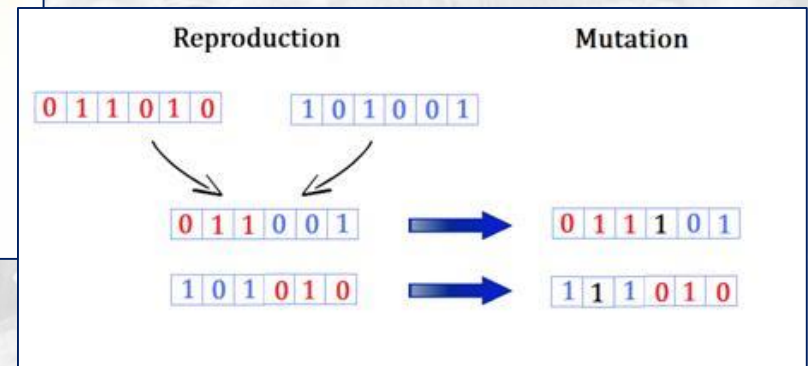
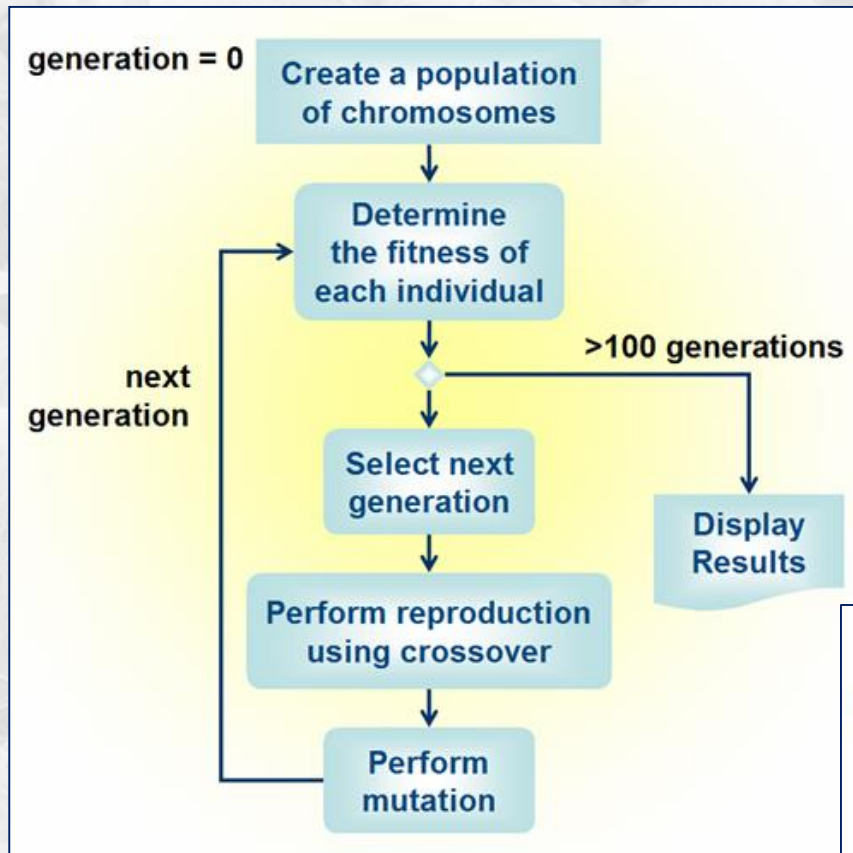
0 1 1 0 1 0

Leardi R. et al. (1992). *Journal of Chemometrics* 6, 267–281

Leardi R. (2000). Application of Genetic Algorithm-PLS for Feature Selection in Spectral Data Sets. *Journal of Chemometrics* 14, 643–655

Leardi R. (2009). Genetic Algorithms. *Comprehensive Chemometrics* 1, 631-653

Selezione regioni spettrali: Algoritmi Genetici



Agris

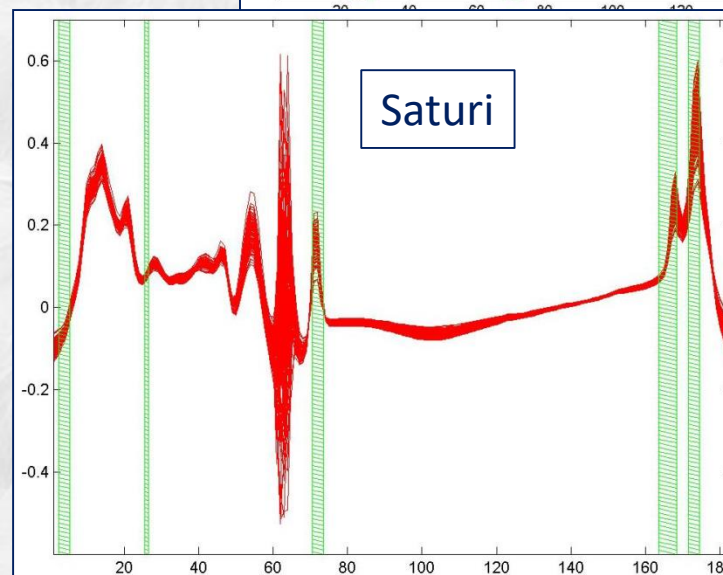
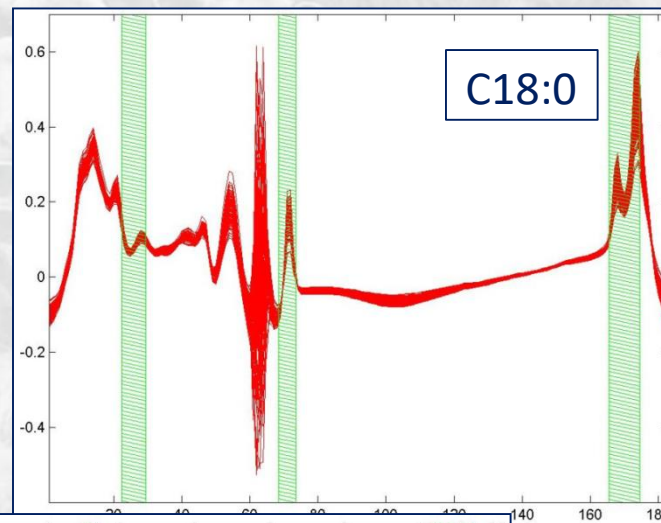
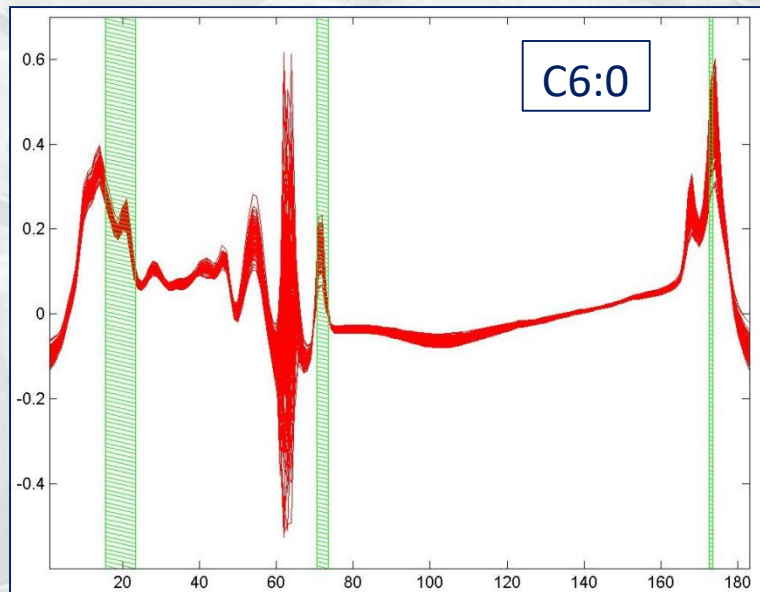
Agencia regionale
per la ricerca in agricoltura



REGIONE AUTÒNOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA

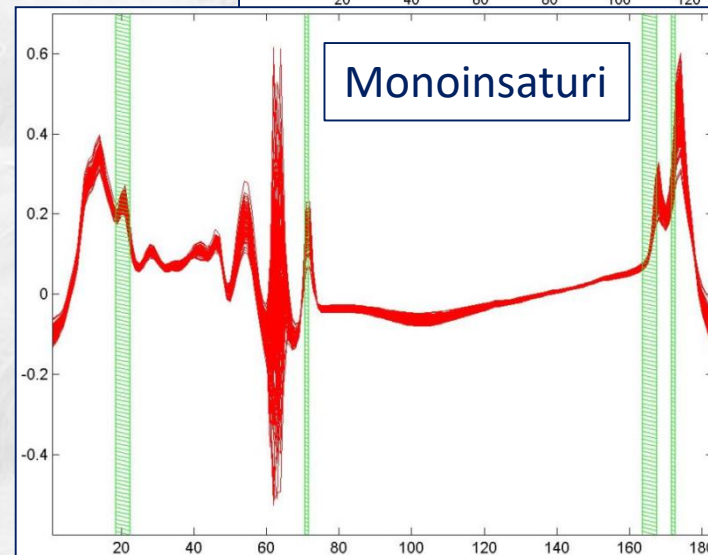
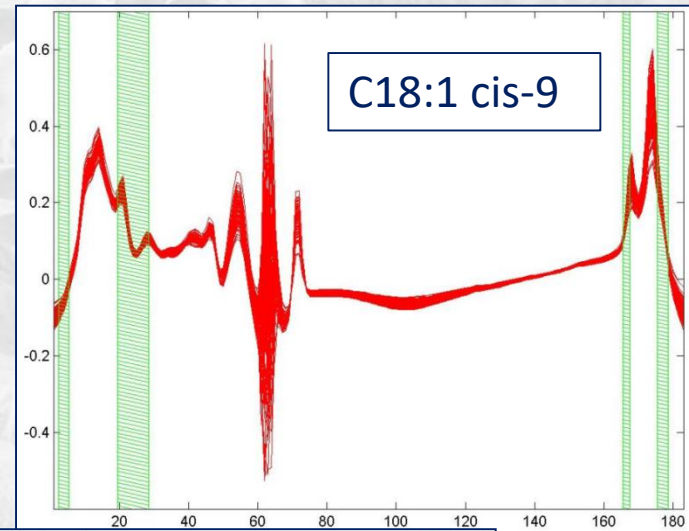
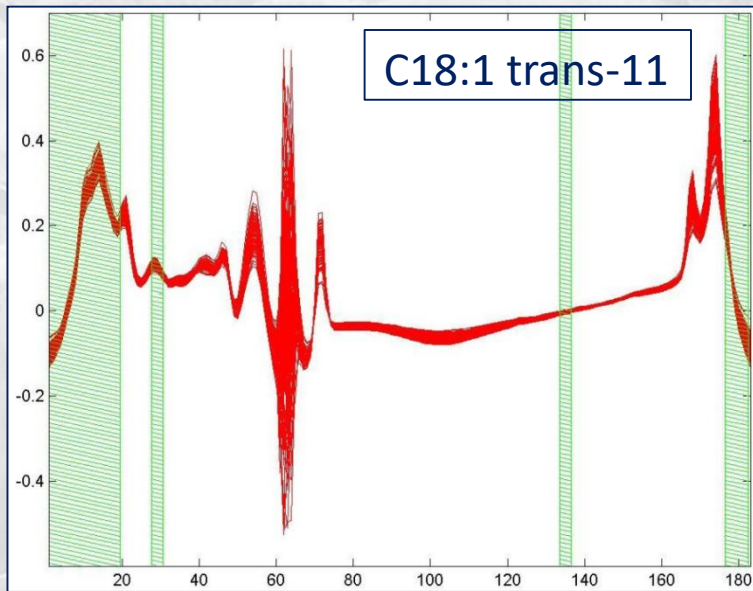


Variabili selezionate dagli algoritmi genetici



- Stretching C-O-C negli esteri
- Stretching C=O negli esteri
- Bending C-H metilici e metilenici

Variabili selezionate dagli algoritmi genetici



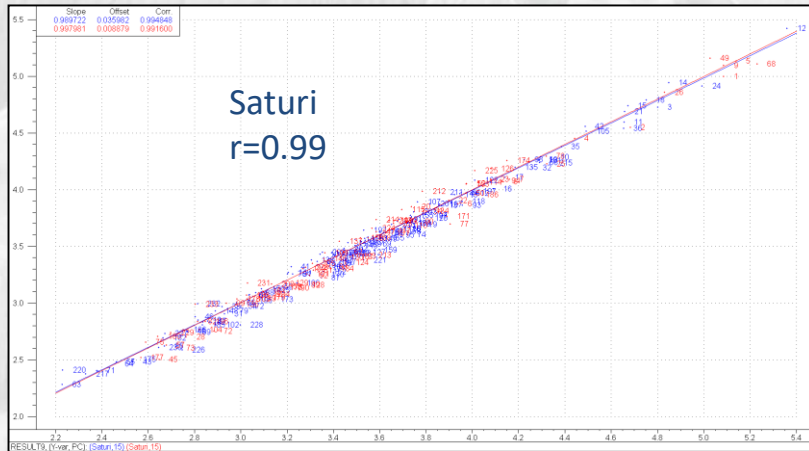
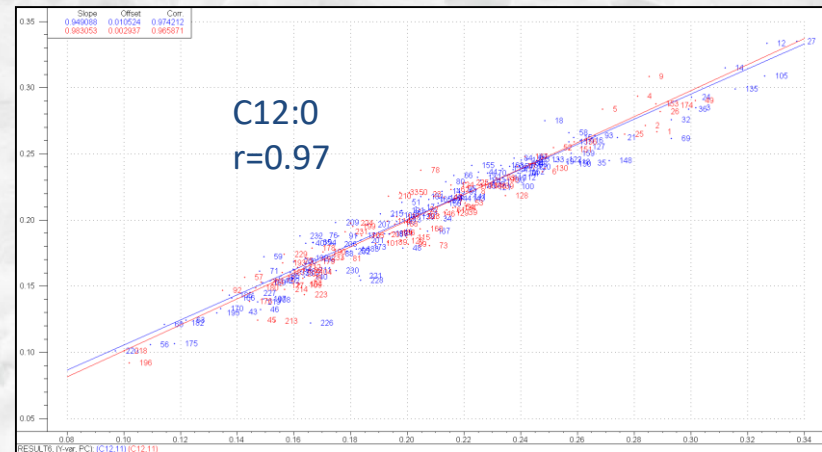
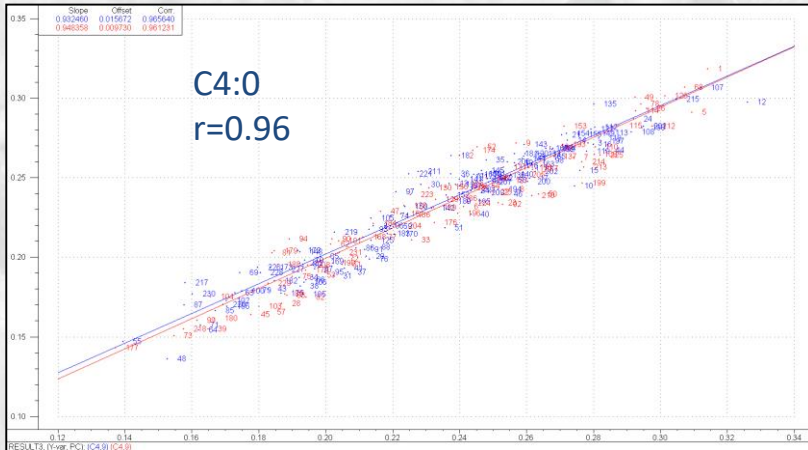
- Bending C-H negli alcheni *trans*
- Stretching C-O-C negli esteri
- Bending C-H metilici e metilenici

Risultati dei modelli

PC = Componenti; RMSEP = Root Mean Square Error of Prediction

Acido Grasso	PC	Numero di variabili spettrali	RMSEP	bias	PC	Numero di variabili spettrali	RMSEP	bias	RMSEP%
C4:0	15	525	0,015	-0,002	9	51	0,014	-0,002	5,9
C6:0	15	525	0,011	0,002	7	36	0,010	0,001	6,0
C8:0	15	525	0,013	0,003	11	39	0,011	0,001	7,7
C10:0	15	525	0,040	0,007	14	87	0,030	0,004	7,5
C12:0	15	525	0,020	0,003	11	75	0,017	0,000	8,1
C14:0	15	525	0,047	0,004	14	66	0,045	0,008	8,6
C16:0	12	525	0,091	-0,002	8	33	0,089	-0,006	7,9
C18:0	15	525	0,062	0,009	11	63	0,066	0,011	12,9
Vaccenico C18:1-t11	15	525	0,039	-0,005	9	93	0,036	-0,004	19,5
Oleico C18:1-c9	15	525	0,124	-0,013	15	51	0,104	-0,012	13,1
Linoleico C18:2-c9,12	14	525	0,024	0,001	14	138	0,022	0,000	16,3
Linolenico C18:3-c9,12,15	7	525	0,020	0,000	5	24	0,023	0,001	23,0
CLA C18:2-c9,t11	11	525	0,017	-0,002	12	45	0,020	-0,004	23,3
Saturi	13	525	0,122	0,017	15	45	0,102	0,013	2,9
Insaturi	13	525	0,121	-0,016	10	33	0,108	-0,018	5,8
Monoinsaturi	13	525	0,118	-0,015	10	30	0,117	-0,010	8,6
Polinsaturi	15	525	0,042	-0,004	14	234	0,039	-0,004	7,8
ω-6	14	525	0,025	0,002	14	93	0,023	0,003	13,2
ω-3	14	525	0,027	-0,001	10	39	0,028	-0,001	17,3

Curve di calibrazione



Agris

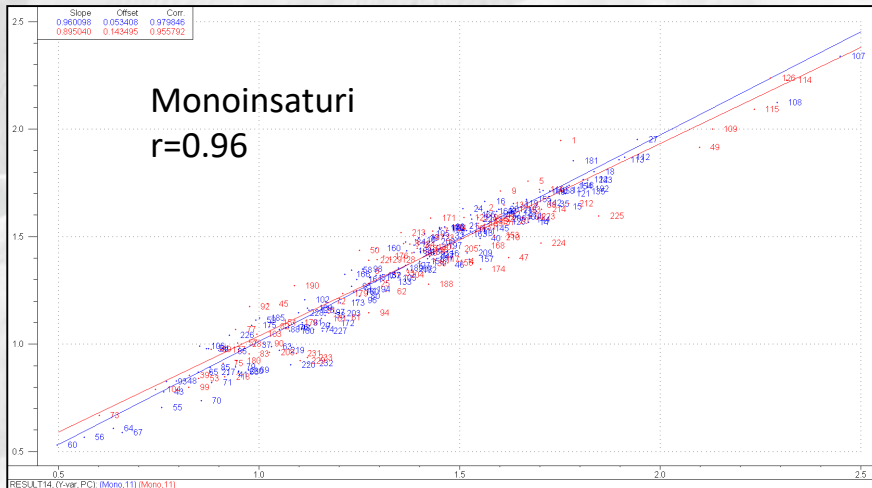
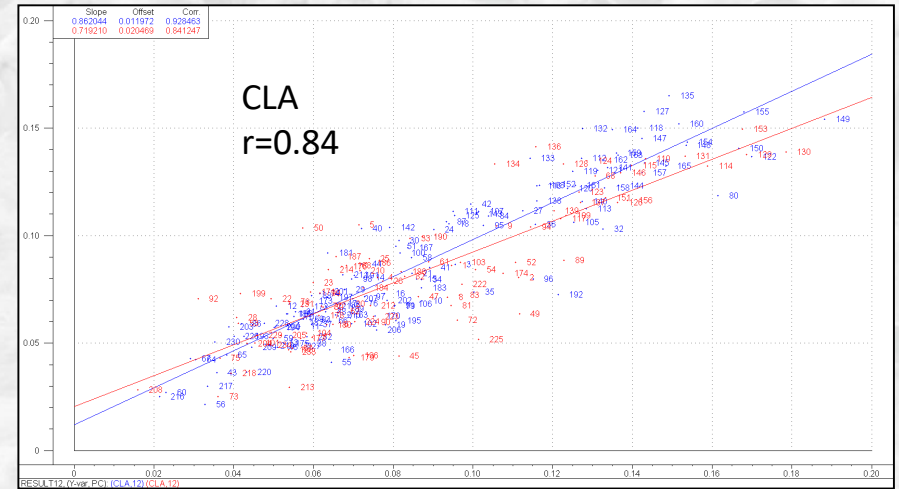
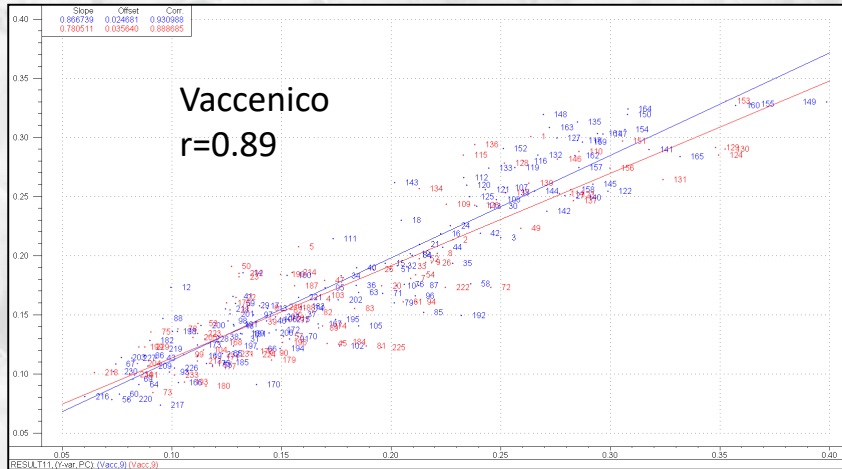
Agenzia regionale
per la ricerca in agricoltura



REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA



Curve di calibrazione



Agris

Agenzia regionale
per la ricerca in agricoltura



REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA





Contents lists available at ScienceDirect

LWT - Food Science and Technology

journal homepage: www.elsevier.com/locate/lwt



Prediction of fatty acid content in sheep milk by Mid-Infrared spectrometry with a selection of wavelengths by Genetic Algorithms



Marco Caredda ^a, Margherita Addis ^a, Ignazio Ibba ^b, Riccardo Leardi ^c,
Maria Francesca Scintu ^a, Giovanni Piredda ^a, Gavino Sanna ^{d,*}

^a Dipartimento per la Ricerca nelle Produzioni Animali, AGRIS Sardegna, I-07040 Olmedo, Italy

^b Associazione Regionale Allevatori (ARA) della Sardegna, Laboratorio Analisi Latte, Località Palloni, I-09170 Nuraxinieddu, Italy

^c Dipartimento di Farmacia, Università degli studi di Genova, Via Brigata Salerno (ponte), I-16147 Genova, Italy

^d Dipartimento di Chimica e Farmacia, Università degli studi di Sassari, Via Vienna 2, I-07100 Sassari, Italy

Agris

Agencia regionale
per la ricerca in agricoltura



REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA




Aggiornamento dei modelli

Set di calibrazione 145 campioni

Set di validazione 97 campioni

Modelli basati su 242 campioni

Agris

 Agenzia regionale
per la ricerca in agricoltura



REGIONE AUTÒNOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA



Aggiornamento dei modelli

Modelli basati su 242 campioni


Nuovo campionamento



Anno 2015, lungo tutto il periodo di lattazione;
279 campioni di latte ovino;
48 aziende sparse nel territorio sardo.

Acquisizione degli spettri FT-MIR.
Analisi GC profilo acidico.

Agris

 Agenzia regionale
per la ricerca in agricoltura



REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA



Aggiornamento dei modelli

Mensilmente, i campioni 2015 acquisiti sono stati utilizzati per effettuare la correzione dell'intercetta (bias) dei modelli già costruiti


Nuovo campionamento



Anno 2015, lungo tutto il periodo di lattazione;
279 campioni di latte ovino;
48 aziende sparse nel territorio sardo.

Acquisizione degli spettri FT-MIR.
Analisi GC profilo acidico.

Agris

 Agenzia regionale
per la ricerca in agricoltura



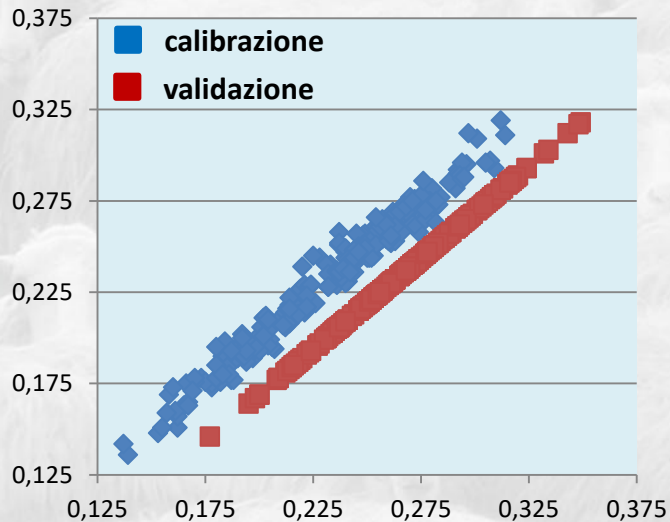
REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA



Aggiornamento dei modelli

Mensilmente, i campioni 2015 acquisiti sono stati utilizzati per effettuare la correzione dell'intercetta (bias) dei modelli già costruiti

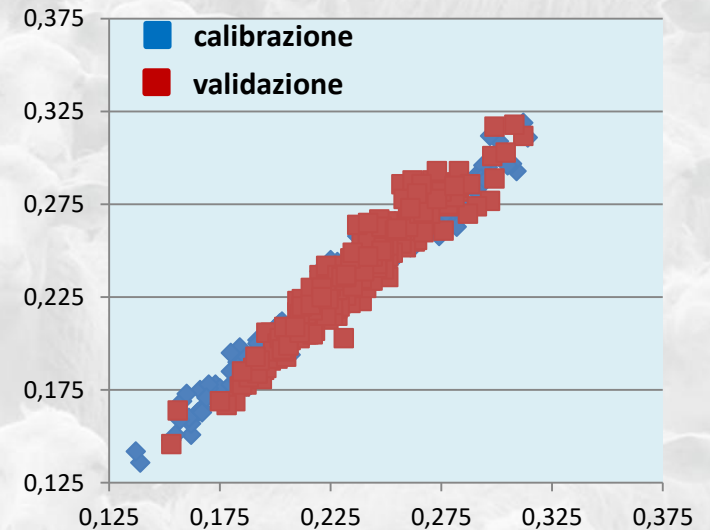
Saturi
RMSEP= 0.300 (7.5%)
bias =-0.290



Correzione del bias



Saturi
RMSEP= 0.077 (1.9%)
bias =0.0003



Agris

Agencia regionale
per la ricerca in agricoltura



REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA

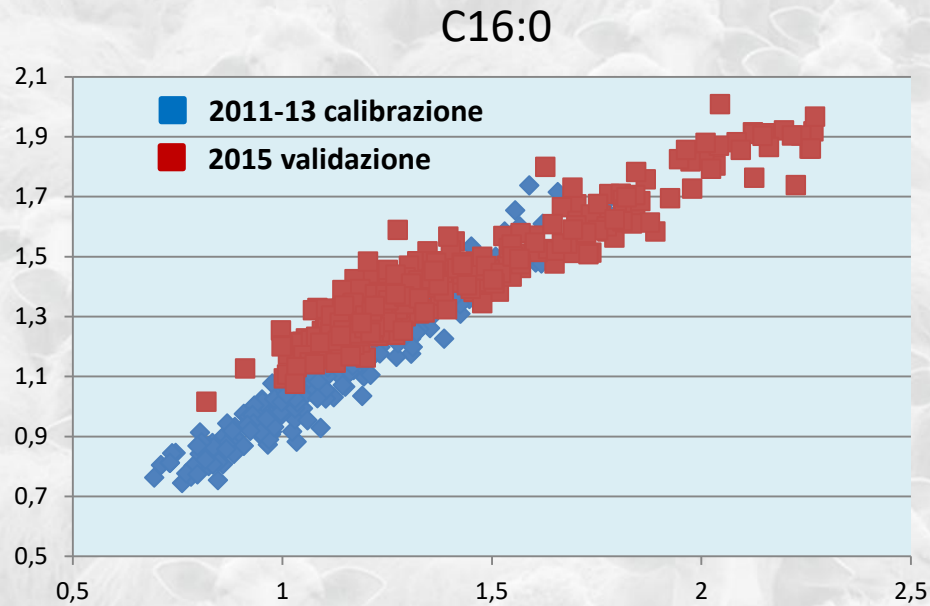


ASSOCIAZIONE REGIONALE ALLEVATORI
DELLA SARDEGNA

PC = Componenti; RMSECV = Root Mean Square Error in Cross Validation; RMSEP = Root Mean Square Error of Prediction

Acido Grasso	# campioni Cross Validazione	# campioni esterni	# variabili spettrali	PC	Varianza Spiegata	RMSECV (RMSECV%)	RMSEP (RMSEP%)
C4:0	242	279	63	15	96.31	0.008 (3.4%)	0.008 (3.4%)
C6:0	242	279	39	7	94.59	0.006 (3.7%)	0.005 (3.0%)
C8:0	242	279	48	9	95.00	0.006 (4.3%)	0.007 (5.0%)
C10:0	242	279	66	15	97.24	0.015 (3.8%)	0.018 (4.4%)
C12:0	242	279	69	15	94.60	0.010 (4.8%)	0.013 (5.7%)
C14:0	242	279	72	14	92.50	0.029 (5.9%)	0.033 (5.2%)
C16:0	242	279	51	14	92.71	0.061 (5.4%)	0.139 (9.7%)
C18:0	242	279	81	13	87.09	0.051 (10.0%)	0.083 (16.5%)
Vaccenico	242	279	87	15	83.64	0.029 (16.7%)	0.038 (22.7%)
Oleico	242	279	42	13	90.36	0.073 (8.9%)	0.075 (8.5%)
Linoleico	242	279	48	11	77.87	0.017 (15.4%)	0.025 (22.0%)
Linolenico	242	279	33	14	86.87	0.016 (20.0%)	0.023 (38.9%)
CLA	242	279	78	15	83.18	0.014 (11.1%)	0.024 (32.5%)
Saturi	242	279	87	15	99.05	0.058 (1.7%)	0.077 (1.9%)
Insaturi	242	279	63	13	98.11	0.057 (3.3%)	0.075 (4.2%)
Monoinsaturi	242	279	51	14	94.84	0.075 (5.5%)	0.091 (6.5%)
Polinsaturi	242	279	120	15	91.95	0.036 (8.5%)	0.044 (12.1%)
ω -6	242	279	87	14	83.28	0.018 (11.8%)	0.028 (15.2%)
ω -3	242	279	75	15	83.80	0.024 (12.5%)	0.029 (30.0%)

Aggiornamento dei modelli



A fine annata di lattazione, i campioni sono stati inseriti nelle calibrazioni.
Incremento del range di calibrazione.



Modelli basati su 520 campioni

Agris

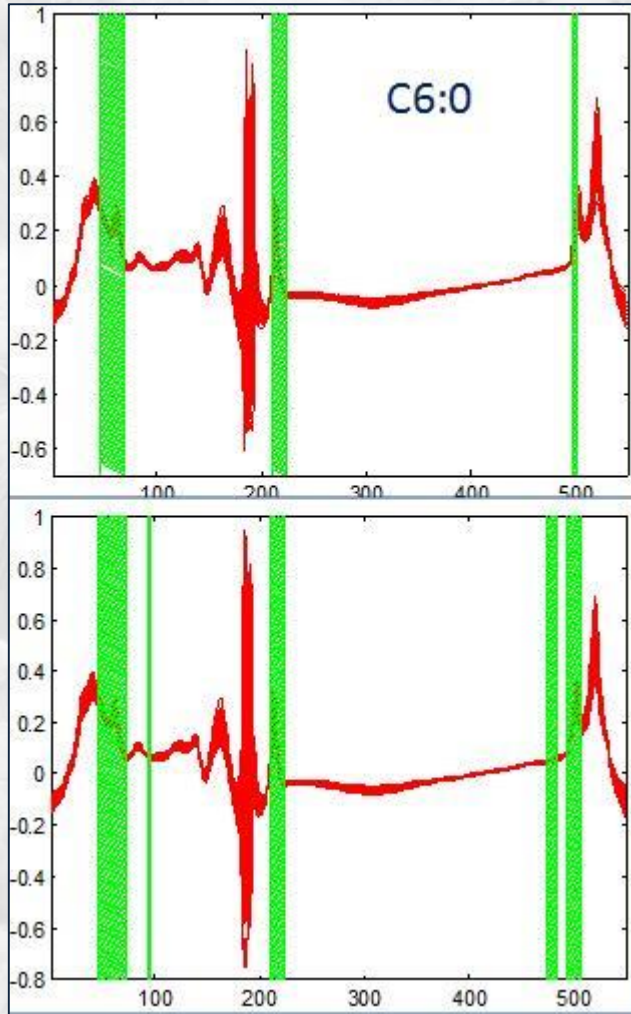
Agencia regionale
per la ricerca in agricoltura



REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA



Aggiornamento dei modelli: rielezione delle bande spettrali



242 campioni (2011-2013)

520 campioni (2011-2015)

Agris

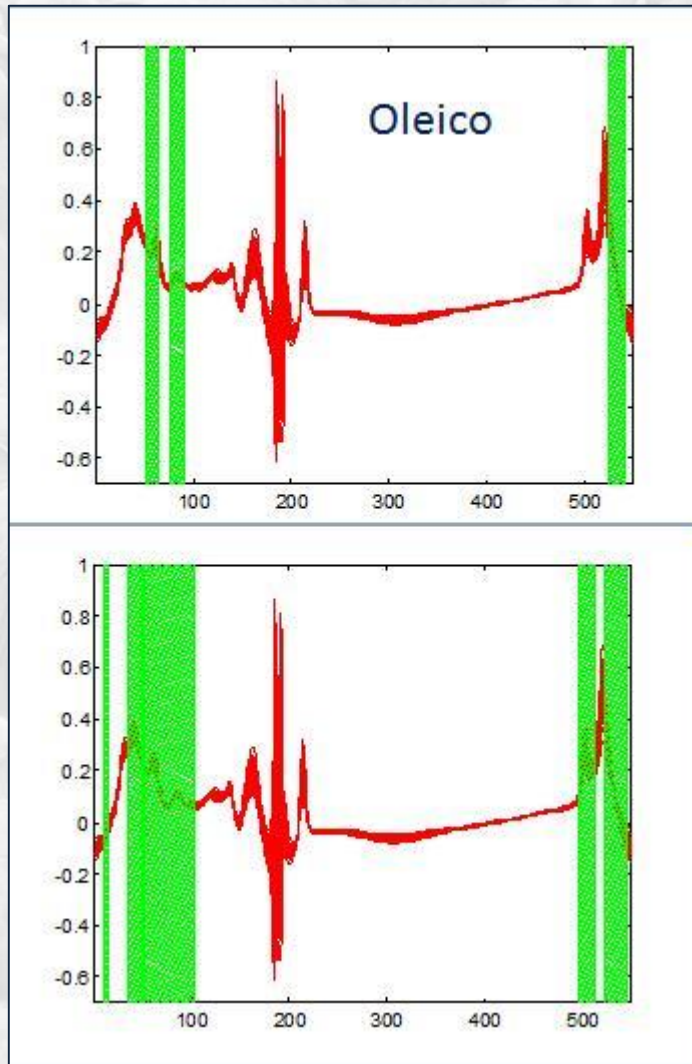
Agencia regionale
per la ricerca in agricoltura



REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA



Aggiornamento dei modelli: rielezione delle bande spettrali



Agris

Agencia regionale
per la ricerca in agricoltura



REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA

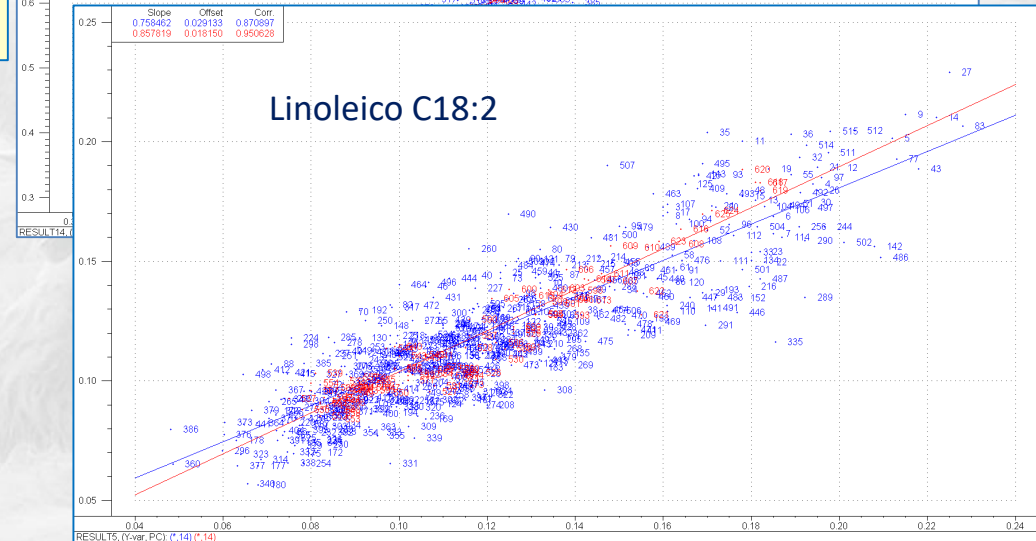
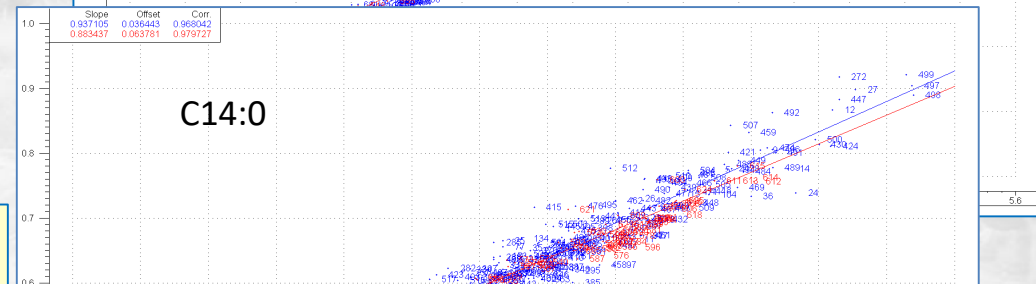
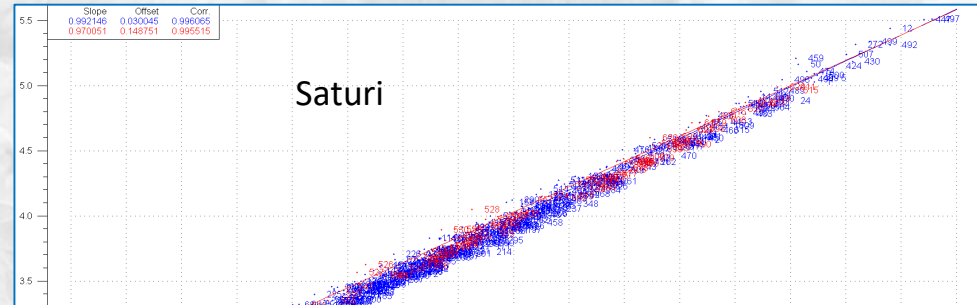


Aggiornamento dei modelli: validazione

modelli costruiti con 520 campioni



Testati con 110 campioni raccolti nell'arco della lattazione del 2017



Evoluzione dei modelli

Acido Grasso	2011-13 RMSEP%	2015 RMSEP%	2017 RMSEP%
	modello con 145 campioni	modello con 242 campioni	modello con 520 campioni
C4:0	5.9%	3.4%	2.1%
C6:0	6.0%	3.0%	2.2%
C8:0	7.7%	5.0%	2.1%
C10:0	7.5%	4.4%	2.7%
C12:0	8.1%	5.7%	5.6%
C14:0	8.6%	5.2%	2.9%
C16:0	7.9%	9.7%	3.9%
C18:0	12.9%	16.5%	15.4%
Vaccenico	19.5%	22.7%	13.7%
Oleico	13.1%	8.5%	6.5%
Linoleico	16.3%	22.0%	8.5%
Linolenico	23.0%	38.9%	15.3%
CLA	23.3%	32.5%	11.1%
Saturi	2.9%	1.9%	1.1%
Insaturi	5.8%	4.2%	1.9%
Monoinsaturi	8.6%	6.5%	3.0%
Polinsaturi	7.8%	12.1%	6.7%
ω -6	13.2%	15.2%	5.6%
ω -3	17.3%	30.0%	10.2%

Modelli robusti

Range di calibrazione elevato
Regioni spettrali informative

Errori in predizione
esterna tra il 1.1% ed
il 15.4%

Predizione corretta
tra il 84.6% e il 98.9%

Predizione
acidi grassi
affidabile



**Controlli di
qualità ARAS**

Il parte: Discriminazione geografica



data set
242 campioni
(2011-2013)

Set di calibrazione (145 campioni)



Costruzione dei modelli

Set di validazione (97 campioni)



Validazione dei modelli

	Nord Sardegna	Centro Sardegna	Sud Sardegna
Calibrazione	80	52	13
Validazione	57	27	13



Agris

Agencia regionale
per la ricerca in agricoltura



REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA



Discriminazione geografica: profilo acidico (Gascromatografia)

Average concentration, standard deviations and range of reference values of the fatty acids and categories of fatty acids in the sheep milk samples collected in Sardinia between 2011 and 2013.

Fatty acid/Class	Average concentration	s ^a	Range	Fatty acid/Class	Average concentration	s ^a	Range
C4:0	0.23	0.04	0.12–0.36	C18:2 t9, c12	0.03	0.03	0.001–0.0180
C6:0	0.16	0.03	0.08–0.25	C18:2 t11, c15	0.02	0.02	0.001–0.076
C7:0	0.003	0.001	0.001–0.009	C18:2 c9, t13	0.03	0.01	0.01–0.06
C8:0	0.14	0.03	0.06–0.22	C18:2 c9, t12 + t8, c12	0.013	0.004	0.005–0.023
C10:0	0.40	0.09	0.17–0.70	C18:2 c9, c12	0.13	0.04	0.06–0.29
C11:0	0.017	0.005	0.005–0.041	C18:2 c9, c15	0.003	0.001	0.001–0.009
C12:0	0.21	0.05	0.10–0.39	CLA C18:2 c9, t11	0.09	0.04	0.02–0.19
C13:0 iso	0.0015	0.0006	0.0005–0.0035	CLA C18:2 t9, c11	0.0016	0.0007	0.0005–0.0062
C13:0 anteiso	0.0020	0.0007	0.0007–0.0056	CLA C18:2 t10, c12	0.007	0.003	0.001–0.030
C14:0	0.5	0.1	0.2–0.9	CLA C18:2 t11, c13	0.005	0.003	0.0005–0.0155
C14:0 iso	0.007	0.002	0.003–0.014	CLA C18:2 t12, t14 + c11, c13	0.003	0.002	0.0007–0.0122
C14:1 c9	0.007	0.003	0.002–0.021	CLA C18:2 t11, t13	0.005	0.003	0.002–0.027
C15:0 iso	0.014	0.005	0.005–0.028	CLA C18:2 t9, t11	0.0020	0.0009	0.0005–0.0091
C15:0 anteiso	0.030	0.008	0.011–0.049	C18:3 c6, c9, c12	0.003	0.001	0.001–0.009
C15:0	0.06	0.01	0.02–0.09	C18:3 c9, c12, c15	0.10	0.04	0.03–0.22
C16:0	1.1	0.2	0.5–1.8	C20:0	0.010	0.003	0.004–0.019
C16:0 iso	0.017	0.005	0.008–0.031	C20:1 c9	0.0013	0.0007	0.0004–0.0045
C16:1 c7	0.020	0.006	0.008–0.036	C20:1 c11	0.0020	0.0009	0.0005–0.0062
C16:1 c9	0.03	0.01	0.01–0.06	C20:2 c11, c14	0.004	0.002	0.001–0.009
C17:0	0.04	0.01	0.02–0.07	C20:3 c5, c8, c11	0.009	0.005	0.002–0.041
C17:0 iso	0.024	0.006	0.008–0.043	C20:3 c8, c11, c14	0.002	0.002	0.0002–0.0214
C17:0 anteiso	0.027	0.008	0.009–0.046	C20:3 c11, c14, c17	0.0014	0.0008	0.0002–0.0053
C17:1 c9	0.011	0.003	0.003–0.025	C20:4 c5, c8, c11, c14	0.006	0.002	0.003–0.014
C18:0	0.49	0.15	0.14–0.89	C20:5 c5, c8, c11, c14, c17	0.005	0.002	0.0002–0.0117
C18:0 iso	0.003	0.001	0.001–0.009	C22:0	0.006	0.002	0.003–0.011
C18:1 t11	0.19	0.08	0.06–0.40	C22:5 c7, c10, c13, c16, c19	0.006	0.003	0.001–0.016
C18:1 t12	0.03	0.01	0.01–0.07	C22:6 c4, c7, c10, c13, c16, c19	0.003	0.002	0.0005–0.0109
C18:1 t13 + t14	0.09	0.03	0.04–0.15	C23:0	0.003	0.002	0.0003–0.0093
C18:1 t15 + c10	0.05	0.03	0.01–0.23	C24:0	0.003	0.002	0.001–0.015
C18:1 c9	0.8	0.2	0.2–1.5	SFA	3.5	0.7	1.7–5.4
C18:1 c11	0.021	0.007	0.008–0.058	UFA	1.8	0.4	0.7–3.0
C18:1 c12	0.011	0.004	0.003–0.023	MUFA	1.34	0.35	0.50–2.45
C18:1 c13	0.006	0.002	0.002–0.011	PUFA	0.5	0.1	0.2–0.8
C18:1 c14 + t16	0.04	0.01	0.02–0.06	n-6	0.17	0.05	0.08–0.33
C18:1 c16	0.009	0.002	0.004–0.015	n-3	0.16	0.06	0.05–0.31
C18:2 t9, t12	0.004	0.003	0.0003–0.0139				

All the concentrations are expressed in g (100 g)⁻¹ of milk.

SFA = Saturated Fatty Acids; UFA = Unsaturated Fatty Acids; MUFA = MonoUnsaturated Fatty Acids; PUFA = PolyUnsaturated Fatty Acids; CLA = Conjugated Linoleic Acids; n-6 = omega-6 fatty acids; n-3 = omega-3 fatty acids; c = cis; t = trans. Coeluted fatty acids are indicated together with the symbol +.

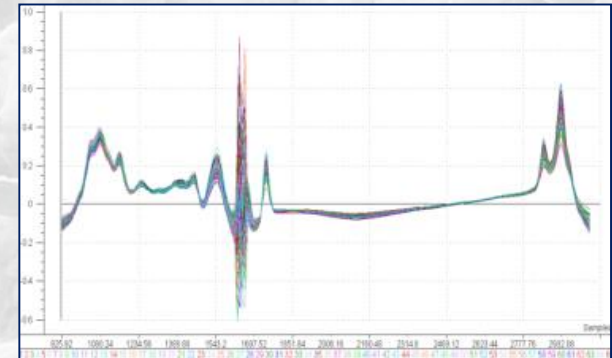
^a s = standard deviation of the distribution.

Careda M., Addis M., Ibba I., Leardi R., Scintu M.F., Piredda G., Sanna G. Building of prediction models by using Mid-Infrared spectroscopy and fatty acid profile to discriminate the geographical origin of sheep milk. LWT - Food Science and Technology 75 (2017) 131-136

Discriminazione geografica: spettri infrarosso (Milkoscan)



→
Pochi secondi



Caredda M., Addis M., Ibba I., Leardi R., Scintu M.F., Piredda G., Sanna G. Building of prediction models by using Mid-Infrared spectroscopy and fatty acid profile to discriminate the geographical origin of sheep milk. LWT - Food Science and Technology 75 (2017) 131-136

Agris

Agencia regionale
per la ricerca in agricoltura



REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA



Discriminazione geografica: profilo acidico

LDA (Analisi Discriminante Lineare)

Predittori:
65 acidi grassi
6 categorie

Set esterno (97 campioni)	Nord Sardegna	Centro Sardegna	Sud Sardegna	% predizioni corrette
Nord Sardegna	56	0	1	98.3%
Centro Sardegna	1	26	0	96.3%
Sud Sardegna	0	0	13	100%

Fatty acid/Class

C4:0
C6:0
C7:0
C8:0
C10:0
C11:0
C12:0
C13:0 *iso*
C13:0 *anteiso*
C14:0
C14:0 *iso*
C14:1 *c9*
C15:0 *iso*
C15:0 *anteiso*
C15:0
C16:0
C16:0 *iso*
C16:1 *c7*
C16:1 *c9*
C17:0
C17:0 *iso*
C17:0 *anteiso*
C17:1 *c9*
C18:0
C18:0 *iso*
C18:1 *t11*
C18:1 *t12*
C18:1 *t13 + t14*
C18:1 *t15 + c10*
C18:1 *c9*
C18:1 *c11*
C18:1 *c12*
C18:1 *c13*
C18:1 *c14 + t16*
C18:1 *c16*
C18:2 *t9, t12*

Fatty acid/Class

C18:2 *t9, c12*
C18:2 *t11, c15*
C18:2 *c9, t13*
C18:2 *c9, t12 + t8, c12*
C18:2 *c9, c12*
C18:2 *c9, c15*
CLA C18:2 *c9, t11*
CLA C18:2 *t9, c11*
CLA C18:2 *t10, c12*
CLA C18:2 *t11, c13*
CLA C18:2 *t12, t14 + c11, c13*
CLA C18:2 *t11, t13*
CLA C18:2 *t9, t11*
C18:3 *c6, c9, c12*
C18:3 *c9, c12, c15*
C20:0
C20:1 *c9*
C20:1 *c11*
C20:2 *c11, c14*
C20:3 *c5, c8, c11*
C20:3 *c8, c11, c14*
C20:3 *c11, c14, c17*
C20:4 *c5, c8, c11, c14*
C20:5 *c5, c8, c11, c14, c17*
C22:0
C22:5 *c7, c10, c13, c16, c19*
C22:6 *c4, c7, c10, c13, c16, c19*
C23:0
C24:0
SFA
UFA
MUFA
PUFA
n-6
n-3

Careda M., Addis M., Ibba I., Leardi R., Scintu M.F., Piredda G., Sanna G. Building of prediction models by using Mid-Infrared spectroscopy and fatty acid profile to discriminate the geographical origin of sheep milk. LWT - Food Science and Technology 75 (2017) 131-136

Agris

Agencia regionale
per la ricerca in agricoltura



REGIONE AUTONOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA



ASSOCIAZIONE REGIONALE ALLEVATORI
DELLA SARDEGNA

Discriminazione geografica: profilo acido

LDA (Analisi Discriminante Lineare)

Predittori:
65 acidi grassi
6 categorie



Selezione degli acidi grassi informativi per la discriminazione (Algoritmi Genetici)

14 acidi grassi selezionati

Acidi grassi a basse concentrazioni

C4:0
C15:0 anteiso
C16:0 iso
C17:0 anteiso
C18:0 iso
C18:1 trans-12
Linoleico C18:2 cis-9, cis-12
C18:2 cis-9, trans-12/trans-8, cis-12
C18:2 trans-11, cis-15
C18:2 trans-9, cis-12
Linolenico C18:3 cis-9, cis-12, cis-15
CLA trans-11, cis-13
C20:3 cis-8, cis-11, cis-14
C20:4 cis-5, cis-8, cis-11, cis-14

Caredda M., Addis M., Ibba I., Leardi R., Scintu M.F., Piredda G., Sanna G. Building of prediction models by using Mid-Infrared spectroscopy and fatty acid profile to discriminate the geographical origin of sheep milk. LWT - Food Science and Technology 75 (2017) 131-136

Discriminazione geografica: profilo acidico

LDA (Analisi Discriminante Lineare)

Predittori:
65 acidi grassi
6 categorie



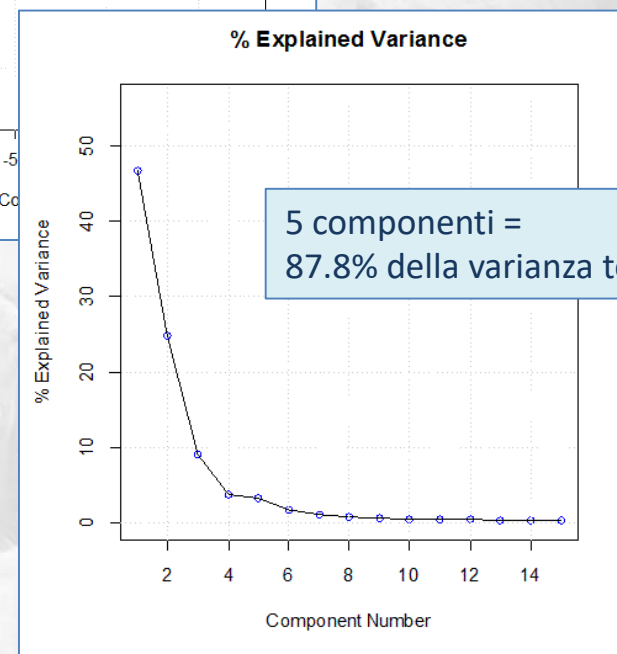
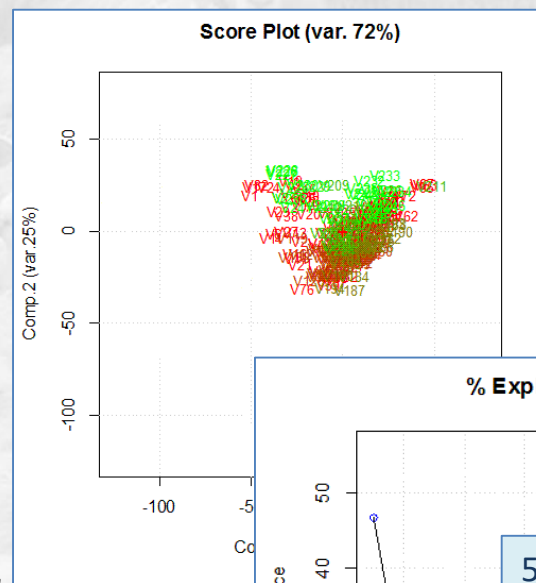
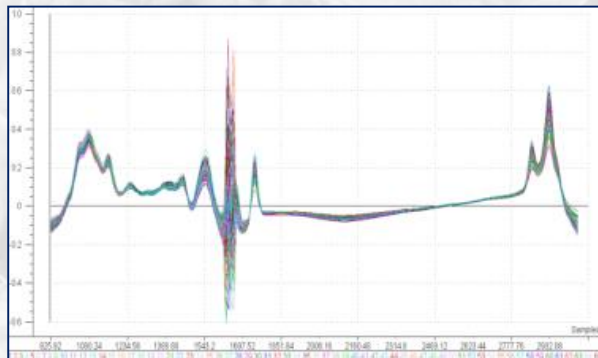
Selezione degli acidi grassi informativi per la discriminazione (Algoritmi Genetici)

Acidi grassi selezionati	Nord Sardegna	Centro Sardegna	Sud Sardegna	% predizioni corrette
Nord Sardegna	53	1	3	93.0%
Centro Sardegna	1	26	0	96.3%
Sud Sardegna	0	0	13	100%

Profilo acidico completo	% predizioni corrette
Nord Sardegna	98.3%
Centro Sardegna	96.3%
Sud Sardegna	100%

Caredda M., Addis M., Ibba I., Leardi R., Scintu M.F., Piredda G., Sanna G. Building of prediction models by using Mid-Infrared spectroscopy and fatty acid profile to discriminate the geographical origin of sheep milk. LWT - Food Science and Technology 75 (2017) 131-136

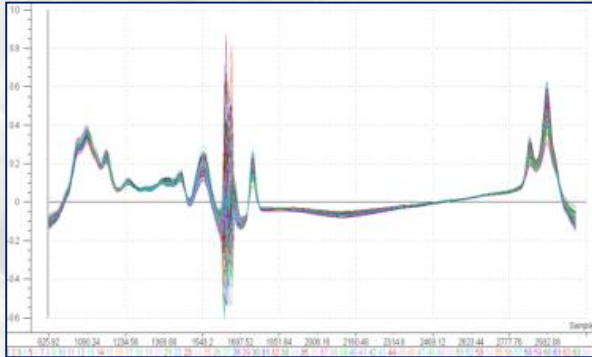
Discriminazione geografica: spettri infrarosso (Milkoscan)



Scores degli spettri	Nord Sardegna	Centro Sardegna	Sud Sardegna	% predizioni corrette
Nord Sardegna	40	10	7	70.2%
Centro Sardegna	3	19	5	70.3%
Sud Sardegna	2	3	8	61.5%

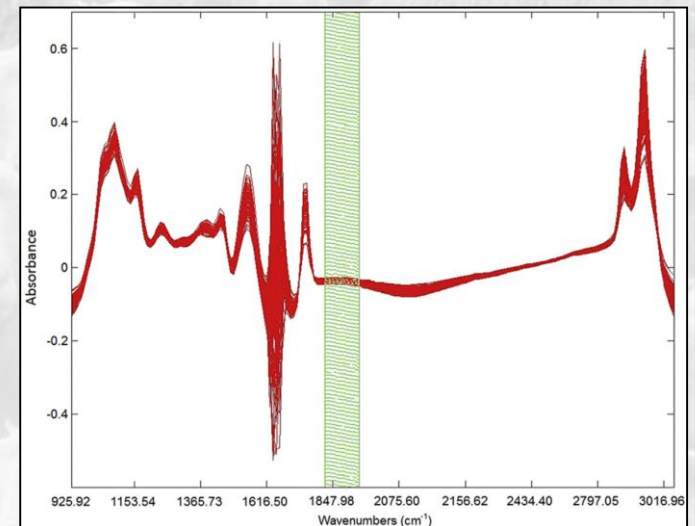
Caredda M., Addis M., Ibba I., Leardi R., Scintu M.F., Piredda G., Sanna G. Building of prediction models by using Mid-Infrared spectroscopy and fatty acid profile to discriminate the geographical origin of sheep milk. LWT - Food Science and Technology 75 (2017) 131-136

Discriminazione geografica: spettri infrarosso (Milkoscan)



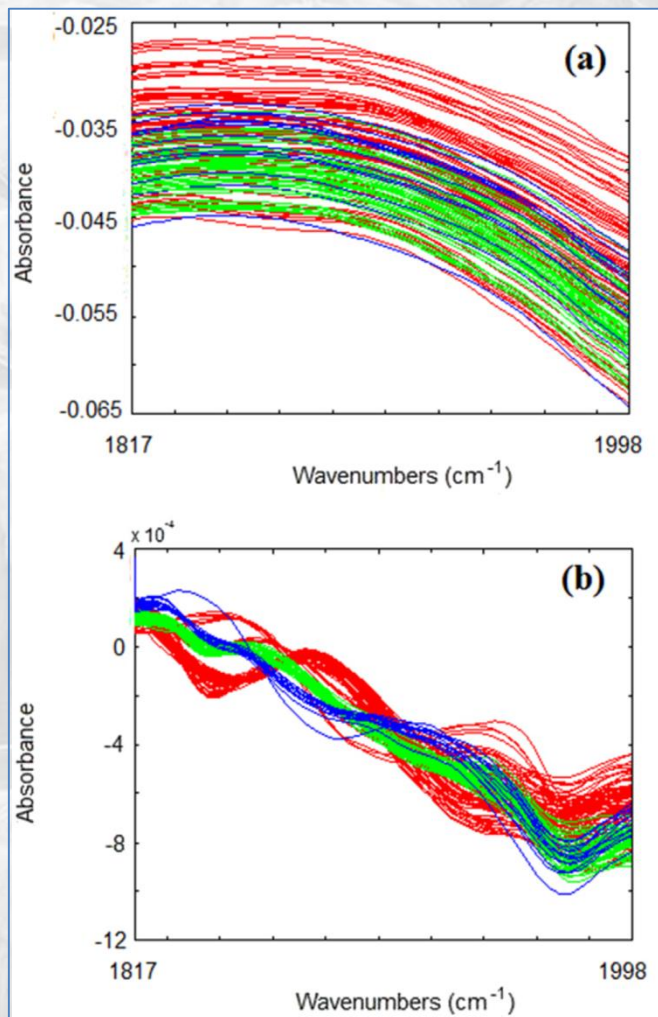
Selezione delle regioni
spettrali informative per
la discriminazione
(Algoritmi Genetici)

Regione spettrale selezionata	Nord Sardegna	Centro Sardegna	Sud Sardegna	% predizioni corrette
Nord Sardegna	57	0	0	100%
Centro Sardegna	1	26	0	96.3%
Sud Sardegna	0	0	13	100%



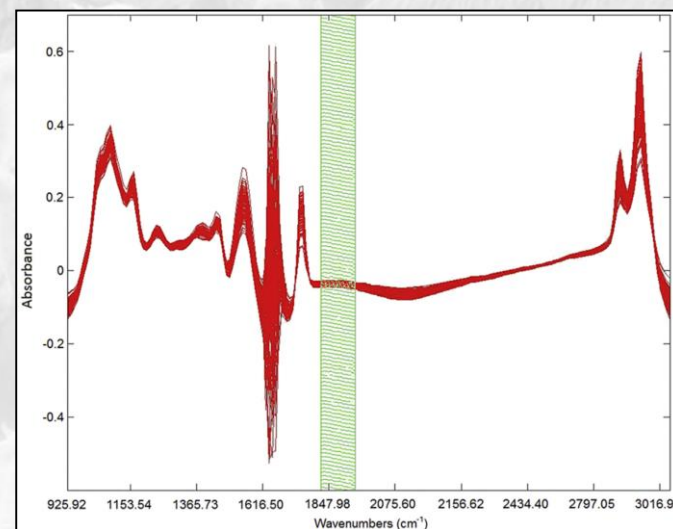
Caredda M., Addis M., Ibba I., Leardi R., Scintu M.F., Piredda G., Sanna G. Building of prediction models by using Mid-Infrared spectroscopy and fatty acid profile to discriminate the geographical origin of sheep milk. LWT - Food Science and Technology 75 (2017) 131-136

Discriminazione geografica: spettri infrarosso (Milkoscan)



Spettro non
pretrattato

Spettro
pretrattato con
derivata prima



Caredda M., Addis M., Ibba I., Leardi R., Scintu M.F., Piredda G., Sanna G. Building of prediction models by using Mid-Infrared spectroscopy and fatty acid profile to discriminate the geographical origin of sheep milk. *LWT - Food Science and Technology* 75 (2017) 131-136

Discriminazione geografica

Capacità degli spettri infrarosso di discriminare l'area geografica di raccolta del latte ovino.

Metodica FT-MIR veloce a basso costo, contro l'utilizzo del profilo acidico ottenuto per gascromatografia

Profilo acidico
Discriminazione corretta al 98.2%

Regione spettrale FT-MIR
Discriminazione corretta al 98.8%

Caredda M., Addis M., Ibba I., Leardi R., Scintu M.F., Piredda G., Sanna G. Building of prediction models by using Mid-Infrared spectroscopy and fatty acid profile to discriminate the geographical origin of sheep milk. LWT - Food Science and Technology 75 (2017) 131-136

Discriminazione geografica

Capacità degli spettri infrarosso di discriminare l'area geografica di raccolta del latte ovino.

Metodica FT-MIR veloce a basso costo, contro l'utilizzo del profilo acidico ottenuto per gascromatografia

Profilo acidico
Discriminazione corretta al 98.2%

Regione spettrale FT-MIR
Discriminazione corretta al 98.8%

LWT - Food Science and Technology 75 (2017) 131–136



ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

LWT - Food Science and Technology

journal homepage: www.elsevier.com/locate/lwt



Building of prediction models by using Mid-Infrared spectroscopy and fatty acid profile to discriminate the geographical origin of sheep milk



Marco Caredda ^a, Margherita Addis ^a, Ignazio Ibba ^b, Riccardo Leardi ^c,
Maria Francesca Scintu ^a, Giovanni Piredda ^a, Gavino Sanna ^{d,*}

^a AGRIS Sardegna, Loc. Bonassai S.S. 291 Sassari-Fertilia, Km. 18,600, Sassari, Italy

^b Associazione Regionale Allevatori (ARA) della Sardegna, Laboratorio Analisi Latte, Località Palloni, I-09170 Nuraxineddu, Italy

^c Dipartimento di Farmacia, Università degli studi di Genova, Via Brigata Salerno (ponte), I-16147 Genova, Italy

^d Dipartimento di Chimica e Farmacia, Università degli studi di Sassari, via Vienna 2, I-07100 Sassari, Italy

I parte:

Sono stati costruiti modelli di predizione dei singoli acidi grassi e categorie di acidi grassi nel latte ovino, inseriti nel Milkoscan

- **Scelta delle regioni spettrali informative**
- Ottenimento di un range di variabilità elevato
- **Errori in predizione molto bassi (1.1% - 15.4%)**
- Predizione corretta tra il 84.6% e il 98.9%

II parte:


Sono stati costruiti modelli di discriminazione geografica del latte ovino

Scelta delle regioni spettrali informative

Predizione corretta della zona geografica di raccolta del latte del 98.9%

Grazie per l'attenzione

Agris

 Agenzia regionale
per la ricerca in agricoltura



**REGIONE AUTÒNOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA**

