Comparison between a diode array NIR spectrophotometer and thermobalance for the rapid analysis of moisture content of roasted beans and ground coffee

R. Beghi\*, A. Tugnolo,V. Giovenzana, A. Casson, R. Guidetti

Department of Agricultural and Environmental Sciences - Production, Landscape, Agroenergy, Università degli Studi di Milano, via Celoria 2, 20133, Milano, Italy

\*Corresponding author

The aim of the research was to perform a comparative study between a near-infrared (NIR) spectrophotometer and a thermobalance (currently widely used in coffee company laboratories) for rapid analysis of the moisture content of roasted beans and ground coffee. The accuracy of the NIR models has been compared with the accuracy of the measurements performed on the same samples with the thermobalance. As a reference, the determination of the water content was carried out also with an official method in a stove at 103 °C.

A benchtop diode array NIR spectrophotometer (Corona Extreme, Zeiss, Germany) for process measurement in the range 950-1650 nm (resolution of 10 nm) equipped with a rotating acquisition system suitable for non-homogeneous samples was used. A total of 266 samples (roasted beans and ground coffee samples) from different coffee blends were analyzed. The data analysis was planned following a threefold approach: (i) exploratory analysis of the spectral data through Principal Components Analysis (PCA); (ii) calculation of predictive models for quantitative estimation of the moisture content using the PLS technique; (iii) comparison between the analytical tools through statistical analysis carried out on the thermobalance data in order to assess the accuracy of the two methods with respect to the stove reference data.

The models calibrated starting from NIR data on ground coffee provided the best results (R2val = 0.96, RMSEP = 0.15%). Very good results were achieved also for the model starting from spectra of roasted coffee beans (R2val = 0.95, RMSEP = 0.16%). A correlation analysis was performed for the two methods with the official method in the stove. Correlation coefficients with the stove data of r = 0.98 and r = 0.96 were achieved for NIR prediction on ground coffee and thermobalance measurements, respectively. For both the methods correlations with the reference one were highly significant (p < 0.01). In conclusion, NIR spectroscopy is a reliable method both for the use in the laboratory to replace the thermobalance and potentially for on-line moisture content measurements on different coffee matrices.

**Keywords:** coffee monitoring,non-destructive, water content, stove, chemometrics

Confronto fra termobilancia e spettrofotometro NIR a diode array per un’analisi rapida del contenuto di umidità di caffè tostato in grani e macinato

R. Beghi\*, A. Tugnolo,V. Giovenzana, A. Casson, R. Guidetti

Dipartimento di Scienze Agrarie e Ambientali - Produzione, Territorio, Agroenergia, Università degli Studi di Milano, via Celoria 2, 20133, Milano, Italia

\*Corresponding author

Scopo della ricerca è stato confrontare le prestazioni di uno spettrofotometro nel vicino infrarosso (NIR) con la metodica analitica attualmente molto utilizzata come metodo di analisi consolidato nei laboratori aziendali (termobilancia) per l’analisi rapida del grado di umidità del caffè tostato in grani e macinato. L’accuratezza dei modelli NIR è stata confrontata con l’accuratezza delle misure ottenibili con termobilancia. Come riferimento è stata eseguita la determinazione dell’umidità con metodo ufficiale in stufa a 103°C.

È stato utilizzato per le misure NIR un sistema a diode array (Corona Extreme, Zeiss, Germany) per misure in riflessione nell’intervallo di lunghezze d’onda 950 nm - 1650 nm, con una risoluzione di 10 nm. Il sistema è dotato di un supporto rotante (TurnStep) per analisi da banco di campioni anche disomogenei. Sono stati analizzati complessivamente 266 campioni sia di caffè tostato in grani che macinato, provenienti da diverse miscele. L’analisi dei dati è stata impostata seguendo un triplice approccio: (i) analisi esplorativa dei dati spettrali tramite Analisi delle Componenti Principali (PCA); (ii) elaborazione dei modelli predittivi per la stima quantitativa del grado di umidità mediante tecnica PLS; (iii) confronto tra strumenti attraverso analisi statistica effettuata sui dati delle termobilance al fine di valutare l’accuratezza delle due metodiche rispetto al dato di riferimento della stufa.

I modelli calibrati partendo da dati NIR su caffè macinato hanno fornito i risultati migliori (R2 val = 0.96, RMSEP = 0.15%). Risultati molto buoni sono stati ottenuti, in termini di capacità di stima, anche dal modello calibrato partendo da spettri di caffè tostato in grani (R2 val = 0.95, RMSEP = 0.16%). È stata eseguita un'analisi di correlazione per i due metodi con il metodo ufficiale nella stufa. Sono stati ottenuti coefficienti di correlazione con i dati della stufa di r = 0.98 per la stima NIR in cross-validazione per le misurazioni del caffè macinato e r = 0.96 per le misure in termobilancia. Per entrambi i metodi le correlazioni con l’analisi di riferimento sono altamente significative (p <0,01).

In conclusione, la spettroscopia NIR risulta essere una metodica affidabile sia per un utilizzo in laboratorio in sostituzione della termobilancia che potenzialmente per un’applicazione direttamente in linea per misure dell’umidità su differenti intermedi di processo.

**Keywords:** monitoraggio caffè, analisi non distruttive, contenuto d’acqua, stufa, chemiometria