AUTENTIFICACIÓN DE ACEITES DE OLIVA VIRGEN MEDIANTE MÉTODOS RÁPIDOS Y FIABLES: UNA NUEVA METODOLOGÍA DE AGNOSTIZACIÓN DE SEÑALES ANALÍTICAS DE NMR DE BAJA FRECUENCIA DE CAMPO

Alejandra Arroyo-Cerezo[1,2], Luis Cuadros-Rodríguez[1], Paolo Berzaghi[3], Ana M. Jiménez-Carvelo[1]

[1]Departamento de Química Analítica, Universidad de Granada, Av Fuentenueva s/n, 18071, Granada, España
[2]Industrial Systems Institute (ISI), Athena Research & Innovation Center, 26504 Patras, Grecia
[3]Department of Animal Medicine, Production and Health, University of Padua, Via Dell'Università 16, 35020 Legnaro, Italia
arroyoc@ugr.es , https://quimicaanalitica.ugr.es/investigacion/grupos/fqm232

Abstract
El control de calidad del aceite de oliva virgen requiere el empleo de métodos analíticos que someten a los laboratorios a una elevada carga de trabajo. Disponer de métodos de cribado rápidos supondría una ventaja considerable. En este contexto, la espectroscopía de resonancia magnética nuclear (NMR) ofrece un gran potencial gracias a la riqueza de información química que proporciona. Sin embargo, los instrumentos convencionales presentan limitaciones de espacio y mantenimiento para su uso en laboratorios de control rutinario. Los instrumentos de baja frecuencia (LF-NMR) se presentan como una alternativa viable, aunque su relativa novedad en el mercado exige trabajar en la estandarización y transferencia de las señales adquiridas. Este trabajo presenta el desarrollo de una metodología de agnostización de señales ^{1}H LF-NMR aplicada a dos equipos de distinta frecuencia (80 y 100 MHz), demostrando la viabilidad de desarrollar un método transferible de control de calidad del aceite de oliva virgen.

1. Introducción

El aceite de oliva ocupa un lugar de privilegio en la cultura alimentaria mediterránea y los mercados internacionales. España es el primer productor mundial, superando el millón y medio de toneladas producidas en campañas de alta cosecha, seguida por Italia y Grecia. Este protagonismo económico convierte al aceite de oliva virgen en uno de los alimentos con mayor riesgo de fraude comercial: mezclas con aceites de semillas más baratos, lo cual es una práctica prohibida por legislación [1], declaraciones de categoría incorrectas, o indicaciones geográficas falsas son algunos de los engaños más frecuentes detectados por las autoridades de control [2].

Para garantizar la autenticidad del producto, el Consejo Oleícola Internacional (COI) y la Unión Europea establecen una batería de métodos analíticos estándar para la evaluación de la conformidad [3,4]. Estos métodos abarcan desde la determinación de la acidez libre y el índice de peróxidos hasta complejos perfiles cromatográficos de esteroles, ceras y ésteres etílicos. Si bien son científicamente rigurosos, presentan limitaciones operativas importantes: requieren equipos costosos, personal especializado, generan residuos de disolventes orgánicos y son difícilmente escalables durante los meses de mayor actividad de la campaña oleícola, cuando los laboratorios de control alcanzan el límite de su capacidad técnica y humana.

En este contexto surge la necesidad de desarrollar métodos analíticos de cribado rápidos, baratos y sostenibles que sirvan de complemento a los métodos oficiales. Las técnicas espectroscópicas, infrarrojo cercano (NIR), Raman o resonancia magnética nuclear (NMR), se perfilan como las candidatas más prometedoras, ya que son técnicas no destructivas, permitiendo analizar la muestra directamente o con mínima preparación, no generan residuos y pueden combinarse con herramientas de inteligencia artificial para extraer la información analíticamente relevante de señales complejas [5].

Entre estas técnicas, la espectroscopía NMR ha demostrado un enorme potencial en el análisis de alimentos, y más concretamente el de aceites vegetales [6]. Convencionalmente se trabaja con instrumentos de alta frecuencia (≥ 250 MHz), que ofrecen excelente resolución espectral, pero presentan importantes barreras de implementación: coste de adquisición superior al millón de euros, necesidad de criogenia para el mantenimiento del imán superconductor o requerimientos de espacio y de infraestructura, que hacen inviables su implementación en un laboratorio de control rutinario [7]. Sin embargo, en los últimos años han emergido en el mercado instrumentos de baja frecuencia y alta resolución (LF-NMR, por sus siglas del inglés) en formato de sobremesa (40–100 MHz), que funcionan a temperatura ambiente con imanes permanentes, no requieren gases criogénicos y son compatibles con el análisis de muestras sin la necesidad de utilizar disolventes deuterados [8]. Estas características los hacen especialmente atractivos para entornos de control de calidad.

El presente trabajo, desarrollado en el grupo de investigación de Química Analítica de la Universidad de Granada, tiene como objetivo demostrar la viabilidad de los instrumentos LF-NMR para la autentificación de aceites de oliva, abordando uno de los principales obstáculos técnicos que limita su uso en la práctica: la variabilidad instrumental de las señales espectrales.

2. El reto de la estandarización en LF-NMR

El uso de señales analíticas espectroscópicas para el desarrollo de modelos de aprendizaje automático requiere que dichas señales sean reproducibles. Un modelo entrenado con datos de un instrumento debe ser capaz de clasificar correctamente muestras analizadas con otro instrumento del mismo tipo, o incluso con el mismo instrumento, pero en fechas diferentes. Esto constituye uno de los requisitos fundamentales para que un método de cribado pueda implementarse de forma generalizada y sea transferible.

Sin embargo, las señales NMR presentan desplazamientos en la posición de los picos no sistemáticos. Estos artefactos instrumentales tienen su origen en pequeñas diferencias en el campo magnético estático, en las condiciones de temperatura durante la adquisición, en el estado del imán permanente o, simplemente, en el paso del tiempo. El resultado es que dos espectros de la misma muestra obtenidos en dos instrumentos o en dos días distintos pueden presentar diferencias que, para un algoritmo de clasificación, son tan significativas como las diferencias entre un aceite de oliva virgen y un aceite de girasol. En la **Figura 1** se ilustra un ejemplo de espectros ^{1}H LF-NMR de un conjunto de muestras de aceite que fueron adquiridos con los mismos parámetros instrumentales, en equipos diferentes: 80 MHz y 100 MHz.

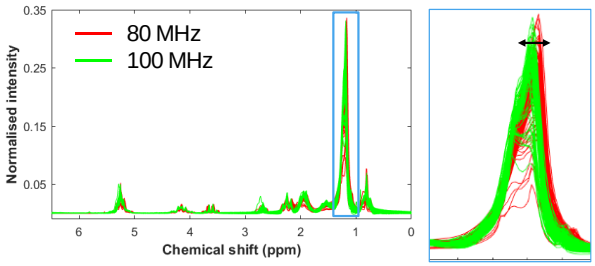

Fig. 1. Espectros ^{1}H LF-NMR de muestras de aceite de oliva adquiridos por instrumentos de 80 MHz (rojo) y 100 MHz (verde).

Las diferencias observadas son interpretadas por algoritmos de aprendizaje automático como diferencias en la composición base de las muestras, lo cual invalidaría el modelo desarrollado para cualquier aplicación práctica. Los algoritmos de alineamiento espectral existentes (como la correlación cruzada, los métodos basados en warping) permiten corregir parcialmente estos desplazamientos, pero tienen una limitación crítica: deben reejecutarse cada vez que se incorpora una nueva señal al conjunto de datos [9]. Esto impide la construcción de bases de datos universales estáticas y la transferencia directa de métodos entre laboratorios.

3. Metodología de agnostización

Este problema ya ha sido previamente abordado en señales cromatográficas por el grupo de investigación FQM-232 de la Universidad de Granada, mediante el desarrollo de la denominada metodología de agnostización [10,11]. El principio fundamental de esta metodología es generar huellas instrumentales agnósticas, es decir, señales de las que ha sido eliminada la componente de variabilidad debida al instrumento y al momento de la medida, conservando íntegramente la información química de la muestra.

Para señales cromatográficas la metodología se basa en medir, junto a cada serie de muestras, una mezcla estándar externa (external standard mix, ESM) de compuestos de referencia que cubran el rango de tiempo de retención de interés. A partir de los tiempos de retención observados para cada compuesto del ESM se calculan unas puntuaciones de retención estándar (Standard Retention Scores, SRS). Mediante interpolación lineal, estas puntuaciones se transfieren a los cromatogramas de las muestras, corrigiendo las derivas instrumentales y generando señales comparables independientemente del estado del instrumento [10].

La primera hipótesis del presente trabajo fue aplicar directamente este mismo enfoque a las señales LF-NMR. Para ello, se seleccionó una mezcla de compuestos químicos que cubrieran todo el rango espectral de interés del aceite de oliva (0–10 ppm). Sin embargo, los resultados fueron insatisfactorios: al calcular las puntuaciones de frecuencia estándar (SFS) a partir del ESM y transferirlas a los espectros de aceite, los desplazamientos no solo no desaparecían, sino que se introducían distorsiones adicionales. La razón de estos resultados insatisfactorios reside en que los picos del propio ESM presentaban desplazamientos no sistemáticos entre sí: la magnitud de la distorsión era diferente en cada señal, de modo que la corrección calculada era en sí misma errónea. Como se observa en la **Figura 2**, tres de los compuestos seleccionados muestran desplazamientos de distinta magnitud al comparar los espectros adquiridos a 80 MHz y 100 MHz, lo que invalida el uso de una corrección interpolada global.

Este hecho condujo a un cambio de enfoque, en el que se optó por usar como referencia un único compuesto cuya señal en NMR fuera lo más representativa posible de la muestra analizada (external reference, ER), en lugar de buscar una referencia compuesta por múltiples compuestos con comportamientos dispares. Para el aceite de oliva, la elección fue la trioleína, ya que es el

triglicérido mayoritario. La comparación visual de los espectros de LF-NMR de la trioleína y del aceite de oliva confirman que la forma y la distribución de las señales son prácticamente idénticas, lo que garantiza que los picos de referencia empleados para la corrección son representativos de todas las regiones del espectro.

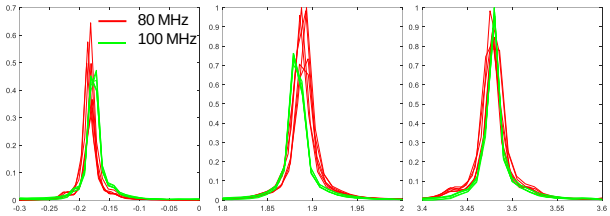

Fig. 2. Señales de tres compuestos del ESM adquiridas por ^{1}H LF-NMR 80 MHz (rojo) y 100 MHz (verde).

El procedimiento matemático desarrollado es el siguiente: (1) se seleccionan en el espectro de la trioleína una serie de picos de referencia bien definidos y distribuidos por todo el rango espectral; (2) para cada espectro de muestra, se localizan las posiciones reales de esos mismos picos, que pueden presentar desplazamientos respecto a las posiciones canónicas de la trioleína; (3) mediante interpolación lineal tramo a tramo, se calcula la función de corrección que mapea la frecuencia observada a la frecuencia canónica; (4) se aplica esa función a todo el espectro de la muestra, reposicionando cada punto espectral.

En la **Figura 3** se observa el espectro ^{1}H LF-NMR de la trioleína, donde se destaca en rojo el rango seleccionado para la agnostización de las señales, así como los cinco picos seleccionados para llevar a cabo el proceso. Se añadieron dos picos ficticios (*dummy*) al inicio y al final para asegurar que el rango seleccionado incluye aquel donde se encuentra la información química de interés.

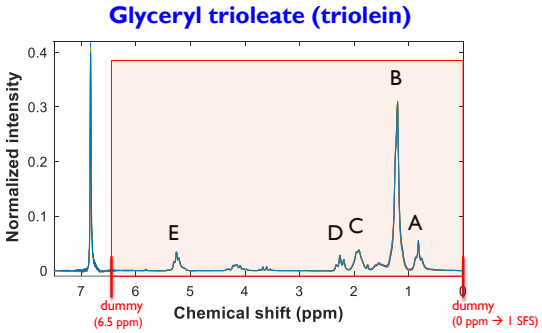

Fig. 3. Señal ^{1}H LF-NMR de trioleína (ER). Las letras A-E representan los picos seleccionados para llevar a cabo la agnostización.

El resultado es un espectro cuyas señales se encuentran en la posición que tendrían si la muestra estuviese compuesta exclusivamente por trioleína, pero sin que se altere la forma, el área ni la información química de cada pico individual. Así, la posición que define cada valor de intensidad de la señal analítica pasa de ser desplazamiento químico (ppm) a puntuaciones de frecuencia estándar (SFS), conformando la huella instrumental agnostizada (véase **Figura 4**).

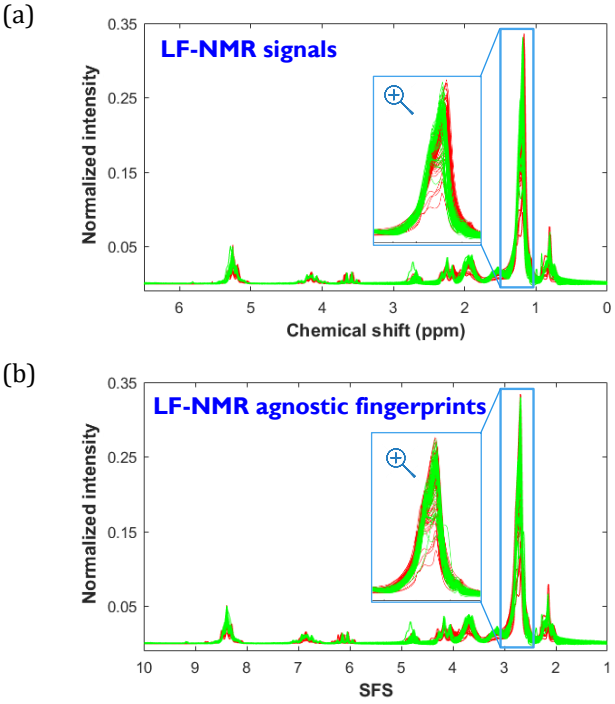

Fig. 4. Señales ^{1}H LF-NMR de aceites vegetales antes (a) y después de la agnostización (b).

Una diferencia fundamental respecto a la agnostización desarrollada para señales cromatográficas es que en este caso no se requiere adquirir el espectro de la trioleína junto a cada nueva serie de muestras a analizar. Las posiciones de los picos de referencia en NMR dependen de las propiedades intrínsecas de la molécula y del campo magnético del instrumento en el momento de la medida, información que se extrae directamente del espectro de la muestra. Por tanto, el proceso de agnostización puede aplicarse a posteriori, sin necesidad de haber incluido ninguna referencia externa en la secuencia de adquisición.

4. Resultados y discusión

La metodología fue validada empleando un conjunto de 102 muestras de aceite de oliva (virgen extra, virgen y lampante), aceites vegetales de semillas (girasol, soja, maíz) y mezclas de aceite de oliva con aceite de girasol en distintas proporciones. Se adquirieron los espectros ^{1}H LF-NMR con dos instrumentos de sobremesa de 80 MHz y 100 MHz, respectivamente, de distintas marcas comerciales siguiendo las condiciones instrumentales previamente optimizadas [12].

Antes de aplicar la agnostización, el análisis de componentes principales (PCA) de las señales ^{1}H LF-NMR reveló que la principal fuente de variabilidad en los datos no era la naturaleza química de la muestra, sino el instrumento utilizado (véase **Figura 5**).

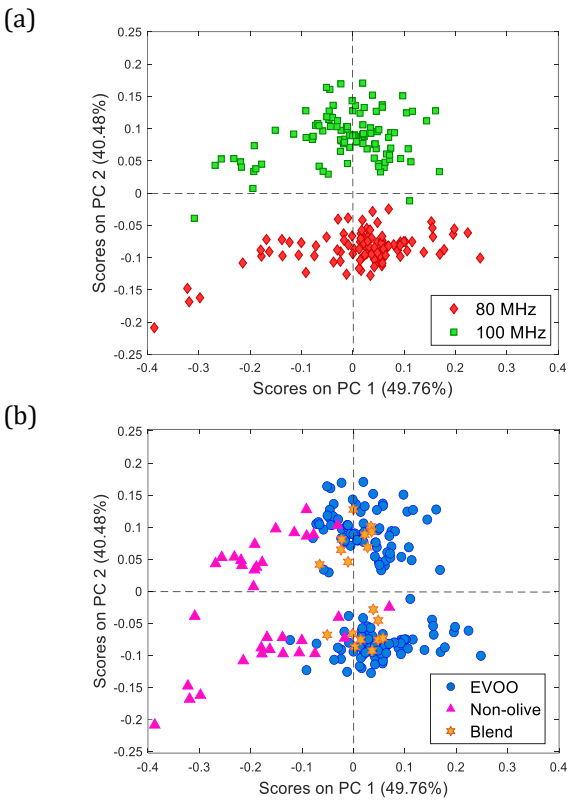

Fig. 5. Resultados del PCA aplicado a las señales ^{1}H LF-NMR de aceites etiquetadas según el instrumento de adquisición (a) y naturaleza de la muestra (b) antes de aplicar la agnostización.

Las señales se agrupaban en dos nubes bien separadas en el espacio de componentes principales por el PC2, explicando más del 40% de la variabilidad de los datos. El gráfico de puntuaciones indica una clara separación atendiendo al equipo empleado para la adquisición de datos (**Figura 5(a)**): 100 MHz en la parte superior y 80 MHz en la parte inferior, independientemente del tipo de aceite. Este resultado confirma que, sin el proceso de agnostización, el instrumento actúa como un confusor que impide el desarrollo de modelos válidos.

Tras aplicar la metodología de agnostización desarrollada, el resultado del PCA fue radicalmente diferente, tal y como muestra la **Figura 6**. La separación por equipo instrumental desapareció: las dos nubes de puntos se fusionaron en una sola, mientras que emergió con nitidez una separación basada en la naturaleza química de la muestra, como se observa en la **Figura 6(b)**: las muestras de aceite de oliva se agruparon separadas de los aceites vegetales no-oliva y de las mezclas, que formaron un grupo intermedio. Este resultado demuestra que la agnostización logra eliminar el efecto instrumental sin destruir la información química relevante para la clasificación, permitiendo por tanto trabajar con dos instrumentos de similares características.

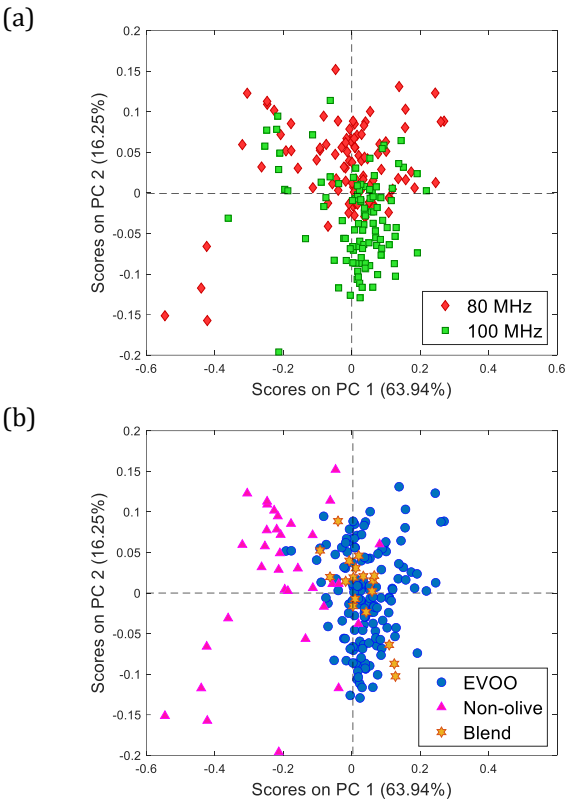

Fig. 6. Resultados del PCA aplicado a las señales ^{1}H LF-NMR de aceites etiquetadas según el instrumento de adquisición (a) y naturaleza de la muestra (b) tras aplicar la agnostización.

A partir de las señales obtenidas, que constituyen ahora las huellas instrumentales agnostizadas, se desarrolló un modelo de clasificación PLS-DA (partial least squares - discriminant analysis) entrenado exclusivamente con señales del equipo de 100 MHz para la discriminación entre aceite de oliva virgen extra (EVOO), como clase objetivo, y la clase no objetivo que incluye los aceites no-oliva y las mezclas. Los resultados gráficos de este modelo se muestran en la **Figura 7**.

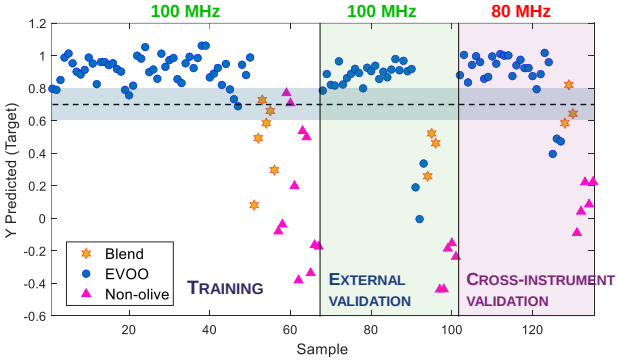

Fig. 7. Resultados del modelo PLS-DA desarrollado a partir de las huellas ^{1}H LF-NMR 100 MHz agnostizadas para la clasificación entre clase objetivo (EVOO) y clase no objetivo (no oliva y mezcla)

Se llevó a cabo una validación cruzada entre instrumentos (*cross-instrument validation*), es decir, se empleó un conjunto de señales adquiridas con el equipo de 80 MHz como conjunto de validación externa del modelo construido con las señales de 100 MHz, obteniendo una precisión de 0.96. Cabe resaltar que a partir de estas huellas instrumentales fue posible detectar la presencia de tres muestras sospechosas de no ser EVOO, su categoría declarada, de acuerdo con un estudio anterior [13]. Estas muestras se incluyeron en ambos conjuntos de validación, y fueron clasificadas por el modelo como clase no-objetivo (véanse los tres puntos azules en la parte inferior derecha de la **Figura 7**).

Además, se llevó a cabo el mismo proceso a la inversa, desarrollando otro modelo PLS-DA a partir de las huellas instrumentales agnostizadas adquiridas con el equipo 80 MHz, y una *cross-instrument validation* utilizando las huellas instrumentales agnostizadas adquiridas por el equipo contrario, de 100 MHz. La **Tabla 1** resume los resultados de los dos tipos de validación (externa y *cross-instrument*) para los dos modelos, 80 y 100 MHz. Estos resultados muestran unas métricas en la *cross-instrument validation* comparables a las obtenidas en la validación externa, confirmando que el modelo es directamente transferible entre instrumentos de distintas características y marcas comerciales.

Tabla 1. Métricas de clasificación de los modelos PLS-DA desarrollados. La CI V hace referencia al uso de datos del equipo contrario.

	100 MHz		80 MHz	
	EV	**CI V**	**EV**	**CI V**
SENS	0.96	0.96	0.77	0.64
SPEC	1.00	0.75	0.88	0.88
PREC	1.00	0.96	1.00	1.00
ACC/EFF	0.97	0.90	0.80	0.70

EV: validación externa; CI V: validación cruzada entre instrumentos; SENS: sensibilidad; SPEC: especificidad; PREC: precisión; ACC/EFF: exactitud o eficiencia.

Los resultados obtenidos tienen implicaciones que van más allá del caso concreto del aceite de oliva. La metodología de agnostización desarrollada para señales LF-NMR representa una solución general al problema de la transferibilidad de métodos analíticos instrumentales basados en aprendizaje automático, uno de los cuellos de botella más importantes para la implantación de la quimiometría y la inteligencia artificial en el control de calidad alimentario.

Desde la perspectiva de la química analítica verde (GAC) [14], los instrumentos LF-NMR de sobremesa ofrecen ventajas considerables: no requieren el uso de disolventes deuterados, el análisis puede realizarse directamente sobre la muestra líquida, la cual puede ser medida de nuevo en el futuro, convirtiéndola por tanto en no-destructiva, el coste de adquisición es entre 10 y 50 veces inferior al de uno de alta frecuencia y no necesitan infraestructura especial. Combinado con la metodología de agnostización, se convierten en herramientas aptas para el análisis rutinario de laboratorio, sin renunciar a la potencia discriminatoria de los métodos quimiométricos más sofisticados.

Un aspecto crítico que conviene subrayar es que la selección de la ER —en este caso la trioleína— es específica del tipo de muestra analizada. Para aplicar la metodología a un alimento diferente, es necesario identificar en primer lugar cuál es el compuesto más representativo del espectro de ese alimento y cuya señal NMR cubra de forma distribuida el rango espectral de interés. Esto implica un trabajo previo de desarrollo metodológico para cada nueva matriz alimentaria, pero una vez realizado, el proceso es completamente reproducible y automatizable.

La posibilidad de construir bases de datos universales de huellas espectrales agnósticas abre una perspectiva especialmente interesante para los organismos reguladores. Una base de datos compartida entre los laboratorios de control de distintos países o regiones productoras permitiría comparar directamente los resultados obtenidos en distintos entornos instrumentales, facilitando la detección de fraudes de origen geográfico o varietal que actualmente requieren procedimientos costosos y poco escalables.

5. Conclusiones

Este trabajo presenta una metodología de agnostización de señales analíticas inédita para espectros de LF-NMR, basada en el uso de la trioleína como referencia externa y en la corrección de posiciones de picos mediante interpolación lineal, siguiendo el enfoque previamente desarrollado para señales cromatográficas. La metodología ha demostrado ser capaz de eliminar el efecto instrumental en espectros obtenidos con distintos equipos de sobremesa, preservando íntegramente la información química relevante para la clasificación de aceites de oliva.

Los modelos PLS-DA desarrollados sobre huellas agnostizadas son directamente transferibles entre instrumentos sin necesidad de reentrenamiento, lo que abre la puerta al desarrollo de métodos de cribado globales aplicables en cualquier laboratorio equipado con un espectrómetro LF-NMR. Junto con las ventajas ambientales y económicas que ofrecen estos instrumentos frente a los de alta frecuencia, los resultados presentados constituyen un paso relevante hacia una química analítica de control alimentario más verde, rápida, sostenible, transferible y accesible.

Como líneas de trabajo futuras, se plantea la extensión de la metodología a otras matrices alimentarias de alto

riesgo de fraude, la integración con plataformas de bases de datos compartidas a nivel europeo, y la evaluación del rendimiento del método en condiciones reales de laboratorio de control durante campañas de producción de alta demanda.

Nótese que este estudio ha sido publicado y pueden ampliarse los detalles en [15].

Agradecimientos

AAC agradece a la Sociedad Española de Química Analítica por la beca otorgada para la asistencia y presentación de este trabajo en el 4th Food Chemistry Conference que tuvo lugar en Glasgow (Reino Unido) en octubre de 2025. AAC agradece al Ministerio de Universidades la beca pre-doctoral FPU (FPU20/04711, extendida a periodo de orientación posdoctoral) durante el cual realizó el presente trabajo. AMJC agradece la ayuda (RYC2021-031993-I) financiada por MCIN/AEI/501100011033 y por "European Union NextGeneration EU/PRTR".

Este trabajo ha contado con la financiación de MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y del programa NextGenerationEU/PRTR de la Unión Europea (proyecto de colaboración público-privada CPP2021-008672). Las muestras de aceite fueron proporcionadas por Central Inspectorate of Quality Protection and Fraud Repression of Agri-food Products (ICQRF), del Ministry of Agricultural Food and Forestry Policies (Rome, Italy).

Referencias

[1] Real Decreto 351/2025, de 30 de abril, por el que se aprueba la norma de calidad de los aceites vegetales comestibles, BOE 119 (2025) 64129-64145. https://www.boe.es/eli/es/rd/2025/04/30/351

[2] F. Hashempour-baltork, S.V. Zade, Y. Mazaheri, A.M. Alizadeh, H. Rastegar, Z. Abdian, M. Torbati, S.A. Damirchi, Recent methods in detection of olive oil adulteration: State-of-the-Art, J. Agric. Food Res. 16 (2024) 101123. https://doi.org/10.1016/j.jafr.2024.101123

[3] Reglamento Delegado (UE) 2022/2104 de la Comisión de 29 de julio de 2022 por el que se completa el Reglamento (UE) n.º 1308/2013 del Parlamento Europeo y el Consejo, en lo que respecta a las normas de comercialización del aceite de oliva, y por el que se derogan el Reglamento (CEE) n.º 2568/91 de la Comisión y el Reglamento de Ejecución (UE) n.º 29/2012 de la Comisión, DOUE L 284 (2022) 1-22. http://data.europa.eu/eli/reg_del/2022/2104/oj

[4] Reglamento de Ejecución (UE) 2022/2105 de la Comisión de 29 de julio de 2022 por el que se establecen las normas relativas a los controles de conformidad de las normas de comercialización del aceite de oliva y a los métodos de análisis de las características del aceite de oliva, DOUE L 284 (2022) 23-48. http://data.europa.eu/eli/reg_impl/2022/2105/oj

[5] A. Cappelli, S. Cividino, V. Redaelli, G. Tripodi, G. Aiello, S. Velotto, M. Zaninelli, Applying spectroscopies, imaging analyses, and other non-destructive techniques to olives and extra virgin olive oil: a systematic review of current knowledge and future applications, Agriculture 14 (2024) 1160. https://doi.org/10.3390/agriculture14071160

[6] H. Alharbi, J. Kahfi, A. Dutta, M. Jaremko, A.H. Emwas, The detection of adulteration of olive oil with various vegetable oils – A case study using high-resolution 700 MHz NMR spectroscopy coupled with multivariate data analysis, Food Control 166 (2024) 110679. https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2024.110679

[7] G. Kupriyanova, M. Smirnov, I. Mershiev, A. Maraşlı, C. Okay, G. Mozzhukhin, B. Rameev, Comparative analysis of vegetable oils by ^{1}H NMR in low and high magnetic fields, J. Food Compos. Anal. 126 (2024) 105877. https://doi.org/10.1016/j.jfca.2023.105877

[8] R.T. Giabelhaus, K. Tarazona Carrillo, S.L. Nam, A.P. de la Mata, J.F. Araneda, P. Hui, J. Ma, J.J. Harynuk, Detection of common adulterants in olive oils by bench top 60 MHz ^{1}H NMR with partial least squares regression, J. Food Compos. Anal. 122 (2023) 105465. https://doi.org/10.1016/j.jfca.2023.105465

[9] C.H. Pérez-Beltrán, A.M. Jiménez-Carvelo, S. Martín-Torres, F. Ortega-Gavilán, L. Cuadros-Rodríguez, Instrument-agnostic multivariate models from normal phase liquid chromatographic fingerprinting. A case study: Authentication of olive oil, Food Control 137 (2022) 108957. https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2022.108957

[10] L. Cuadros-Rodríguez, F. Ortega-Gavilán, S. Martín-Torres, S. Medina-Rodríguez, A.M. Jiménez-Carvelo, A. González-Casado, M.G. Bagur-González, Standardization of chromatographic signals – Part I: Towards obtaining instrument-agnostic fingerprints in gas chromatography, J. Chromatogr. A. 1641 (2021) 461983. https://doi.org/10.1016/j.chroma.2021.461983

[11] L. Cuadros-Rodríguez, S. Martín-Torres, F. Ortega-Gavilán, A.M. Jiménez-Carvelo, R. López-Ruiz, A. Garrido-Frenich, M.G. Bagur-González, A. González-Casado, Standardization of chromatographic signals – Part II: Expanding instrument-agnostic fingerprints to reverse phase liquid chromatography, J. Chromatogr. A. 1641 (2021) 461973. https://doi.org/10.1016/j.chroma.2021.461973

[12] A. Arroyo-Cerezo, A.M. Jiménez-Carvelo, R. López-Ruíz, M. Tello-Liébana, L. Cuadros-Rodríguez, Optimising the acquisition conditions of high information quality low-field NMR signals based on a cutting-edge approach applying information theory and Taguchi's experimental designs – virgin olive oil as an application example, Anal. Chim. Acta 1332 (2025) 343350. https://doi.org/10.1016/j.aca.2024.343350

[13] A. Arroyo-Cerezo, X. Yang, A.M. Jiménez-Carvelo, M. Pellegrino, A.F. Savino, P. Berzaghi, Assessment of extra virgin olive oil quality by miniaturized near infrared instruments in a rapid and non-destructive procedure, Food Chem. 430 (2024) 137043. https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2023.137043

[14] A. Gałuszka, Z. Migaszewski, J. Namieśnik, The 12 principles of green analytical chemistry and the SIGNIFICANCE mnemonic of green analytical practices. Trends Anal. Chem. 50 (2013) 78-84. https://doi.org/10.1016/j.trac.2013.04.010
[15] A.M. Jiménez-Carvelo, A. Arroyo-Cerezo, P. Berzaghi, C.H. Pérez-Beltrán, M. Tello-Liébana, L. Cuadros-Rodríguez, Standardized analytical multivariate methods via agnostization of LF-NMR signals – Updating extra virgin olive oil authentication as practical example, Talanta 297 (2026) 128730. https://doi.org/10.1016/j.talanta.2025.128730

Este artículo está sujeto a la Licencia de Reconocimiento–No Comercial-Sin Obra derivada

https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/3.0/es/