

Elaborazioni chemiometriche nel settore conciario. Metodi esplorativi applicati ad analisi spettrali su campioni di cuoio.

Indagini spettrometriche, immagini e dati di processo possono contenere molte informazioni, ma per trasformarle in indicazioni utili occorre organizzarle e interpretarle. Lo scopo è partire dalle misure per arrivare a strutturare e classificare le informazioni in modo che possano, in seguito essere utilizzate per creare modelli predittivi di supporto a processi decisionali.

1. Esplorazione Non Supervisionata

Approccio Esplorativo (Unsupervised)

OBIETTIVO PRIMARIO

Rivelare pattern intrinseci, raggruppamenti spontanei e trend nella matrice descrittori X senza etichette a priori.

INFORMAZIONE USATA

Esclusivamente i segnali strumentali X (spettri, cromatogrammi, parametri). Nessuna variabile risposta.

METODI CARDINE

- Principal Component Analysis (PCA)
- Cluster Analysis (CA gerarchica, k-means, Kohonen SOM)

2. Classificazione Qualitativa

Approccio Predittivo Supervisionato (Supervised)

OBIETTIVO PRIMARIO

Assegnare campioni incogniti a classi discrete note o validare l'appartenenza a una classe target (autenticità).

INFORMAZIONE USATA

Matrice X + Indice di classe noto a priori per ogni campione del set di calibrazione (training set).

DUE PARADIGMI

- Metodi Discriminanti (LDA, QDA, k-NN, PLS-DA): suddividono lo spazio X in regioni decisionali.
- Class-Modelling (SIMCA, UNEQ): definiscono regioni di accettazione per ciascuna classe.

3. Calibrazione Quantitativa

Regresione Continua Multivariata Supervisionata (Supervised)

OBIETTIVO PRIMARIO

Predire valori numerici continui di una proprietà Y (concentrazione, titolo, parametro fisico) dal profilo spettrale X.

INFORMAZIONE USATA

Matrice X + Valori di riferimento quantitativi Y ottenuti da un metodo analitico primario validato.

METODI CARDINE

- Lineari: MLR, PCR, Partial Least Squares (PLS)
- Non Lineari: Reti Neurali (ANN), Support Vector Regression (SVR)

L'applicazione dei metodi esplorativi non supervisionati a misure spettrometriche su campioni di cuoio mostra come questi strumenti possano, a partire dai soli dati grezzi, descrivere materiali e processi su scale diverse: dalla composizione di un campione alle variazioni a caratteristiche superficiali della pelle.

Il nucleo della parte esplorativa è la Principal Components Analysis (PCA), il cui obiettivo è trovare modi di identificare e magnificare la variabilità tra i dati i quali, diversamente, sarebbero stati di più difficile interpretazione., come in una sequenza di spettri NIR.

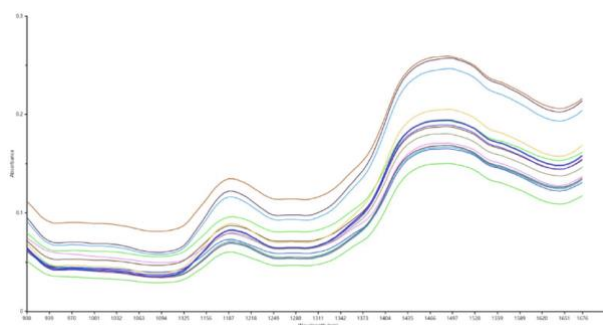
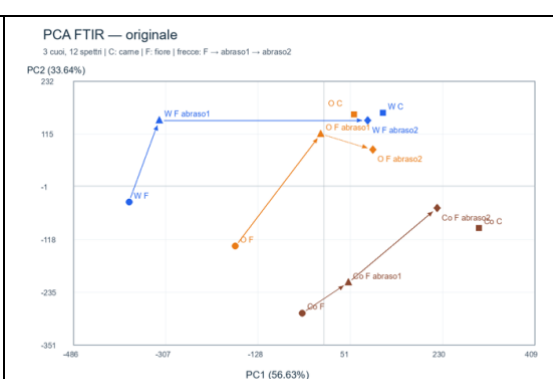
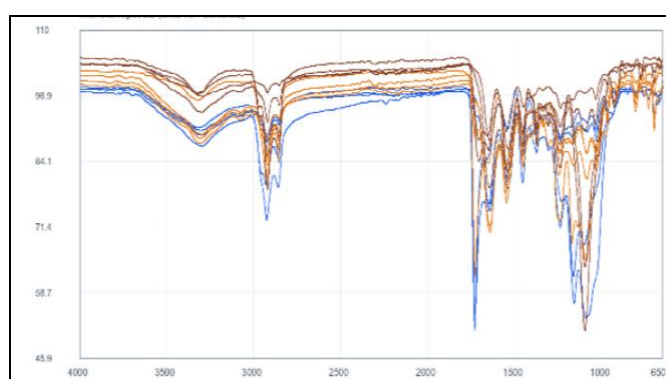
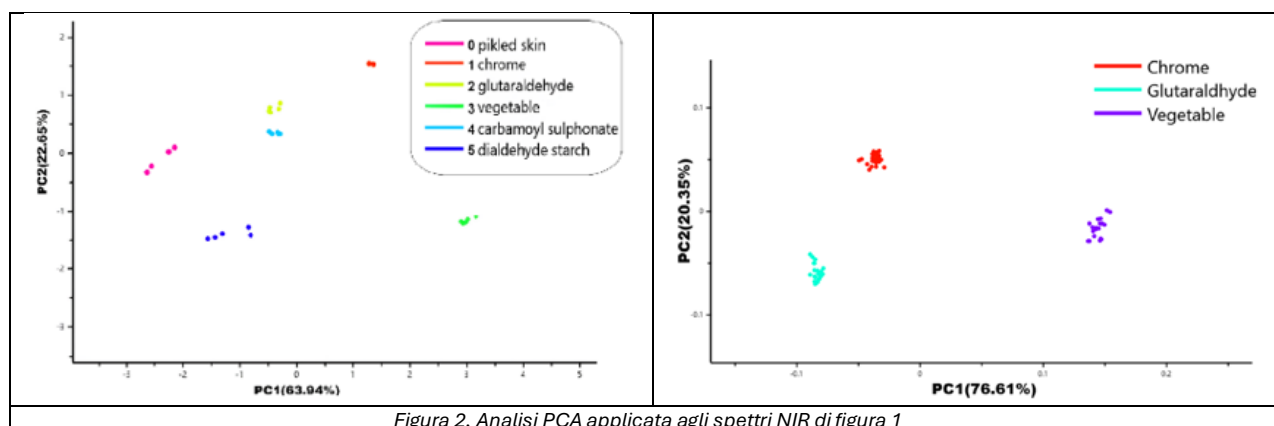
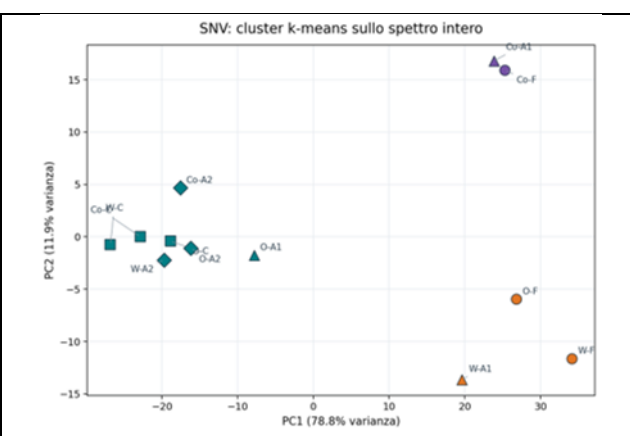
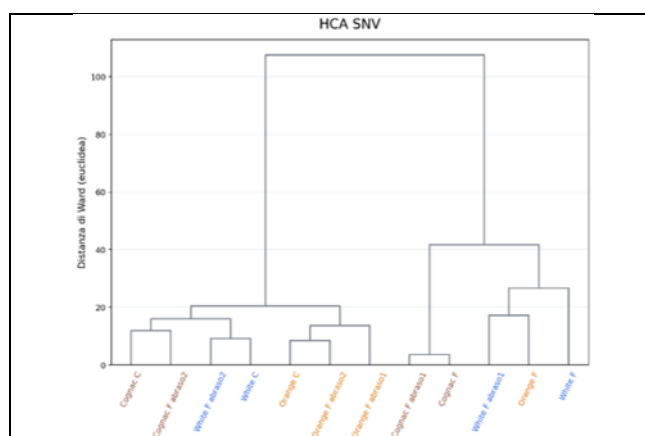


Figura 1. Spettri NIR di campioni di cuoio ottenuti con metodi di concia differenti



Anche altri metodi esplorativi possono essere applicati, da soli o in sequenza con la PCA, per avere ulteriori informazioni di classificazione.

In particolare, la Hierarchical Cluster Analysis (HCA) ed il metodo k-means, aiutano a individuare somiglianze, differenze e possibili raggruppamenti senza assegnare in anticipo i campioni a categorie.



Eventuali pretrattamenti spettrali, tra cui SNV, smoothing e derivate, possano cambiare il peso delle variazioni osservate: la scelta è da motivare in base al problema, perché un trattamento inappropriato può mettere in risalto differenze indesiderate.

Tutte le analisi illustrate, PCA, HCA e k-means, mostrano come i profili possano separarsi secondo modalità di concia, trattamento e stato della superficie.

Il passaggio dai metodi esplorativi ai modelli supervisionati può avvenire attraverso l'applicazione di diversi metodi: tra questi PLSR (Partial Least Square Regression) per stimare proprietà numeriche e PLS-DA (Partial Least Square Discriminant Analysis) o SIMCA (Soft Independent Modelling of Class Analogy) risultano i più applicati, così come riscontrato in una ricognizione di 22 pubblicazioni scientifiche sull'argomento relative al settore conciario.

Dott. Leopoldo Esposito

15 Ottobre 2026