

## **Spettroscopia nel Vicino Infrarosso (NIR) e Chemiometria: Applicazioni nel Controllo di Qualità e nell'Industria Conciaria – Parte 2**

### **Applicazioni della tecnica: dall'industria alimentare al controllo di prodotto sulla pelle**

La spettroscopia NIR è una tecnica analitica ormai ampiamente affermata, con applicazioni qualitative e quantitative altamente efficienti, che stanno rapidamente guadagnando popolarità, soprattutto nel controllo della produzione. Il suo fascino risiede principalmente nel basso costo e nel fatto che spesso non richiede alcuna preparazione del campione. Attualmente, la spettroscopia NIR è ampiamente utilizzata per il controllo di qualità sia in linea che in laboratorio, in settori come **l'industria agroalimentare** (Hetta et al., 2017; Vincent & Dardenne, 2020) e **farmaceutica** (Amigo et al., 2008; Swarbrick, 2014). Inoltre viene anche utilizzata per la differenziazione dei rifiuti plastici, in quanto è in grado di distinguere diversi tipi di plastica attraverso database chemiometrici, facilitandone una successiva separazione meccanica (Zheng et al., 2017).

In particolare, nell'ambito dell'autenticazione dell'origine dei prodotti alimentari e anticontraffazione, moltissimi studi in letteratura evidenziano le potenzialità della tecnica, per esempio, **per discriminare l'origine geografica** di differenti prodotti quali: oli di oliva (Woodcock et al., 2008), della carne (Sun et al., 2011), del formaggio (Karoui et al., 2006), del miele (Woodcock et al., 2007) e perfino dei pistacchi di Bronte (Vitale et al., 2012). In studi recenti, l'accoppiamento del NIR con telecamere iperspettrali e metodi chemiometrici ha persino permesso di valutare in modo non distruttivo e quantitativo il contenuto di collagene nei **manufatti archeologici** consentendo di individuare punti di campionamento strategici per l'analisi al radiocarbonio (Naito et al., 2020). Alla luce della crescente richiesta di miglioramenti industriali, in particolare all'interno della comunità europea, la spettroscopia nel vicino infrarosso (NIR) potrebbe essere adatta a supportare questi obiettivi di miglioramento 5.0 di controllo dei prodotti e processi nell'industria conciaria. In letteratura sono presenti alcuni lavori molto interessanti che prospettano l'implementazione della spettroscopia NIR nell'ambito conciario, dimostrandone le potenzialità.

**Ad esempio, nello studio di Braz et al. (2018)** si è analizzato il potenziale della spettroscopia NIR per valutazione di alcune qualità di pelli bovine (sia finite che semilavorate), un aspetto cruciale nell'industria conciaria. Per raggiungere questo obiettivo, sono stati costruiti modelli basati su test fisico-meccanici, prendendo in considerazione parametri fondamentali come la **resistenza alla trazione, l'allungamento percentuale, la resistenza allo strappo e la resistenza allo strappo a doppio foro**. Per la classificazione della qualità della pelle, sono stati applicati tre modelli chemiometrici: k-nearest neighbor (kNN), soft independent modeling of class analogy (SIMCA) e partial least squares-discriminant analysis (PLS-DA).

I risultati mostrano che l'accuratezza dei modelli varia tra l'85% e il 93%, con tassi di falsi allarmi compresi tra il 9% e il 14%. Tra i modelli, il PLS-DA si è dimostrato il più performante, raggiungendo un'accuratezza del 100% nella validazione. Tuttavia, per il parametro di

resistenza alla trazione, i valori ottenuti sono stati inferiori rispetto agli altri parametri, con percentuali di successo che vanno dal 52% per kNN al 74% per SIMCA. Gli altri parametri, invece, hanno mostrato tassi di successo tra l'87% e il 100%.

Questi risultati suggeriscono che la combinazione della spettroscopia NIR con modelli chemiometrici rappresenta un'alternativa promettente ai tradizionali test fisico-meccanici, i quali risultano più lunghi, costosi e distruttivi. L'approccio proposto permette una rapida valutazione della qualità della pelle direttamente nell'ambiente industriale, favorendo un controllo più efficiente e meno invasivo del prodotto finito.

In un altro interessante lavoro di ricerca di **Cantero et al. (2009)**, sono state utilizzate sia la tecnica di analisi spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier (FTIR) che la spettroscopia nel vicino infrarosso (NIR) in combinazione con tecniche di analisi riduzione della dimensionalità, **per determinare i trattamenti di rifinizione applicati ai campioni di pelle in maniera non distruttiva**. In questo lavoro sono stati esaminati 63 campioni di pelle sottoposti a tre tipi di rifinizione: resine plastiche, trattamento con cera/olio e correzione meccanica del fiore. Il risultato è stato che, attraverso l'analisi chemiometrica degli spettri, è stato possibile classificare i campioni in base al trattamento di rifinizione, in modo da utilizzare il modello per un successivo riconoscimento non distruttivo. In particolare, l'analisi PCA non ha fornito risultati ottimali, poiché non ha permesso una netta distinzione dei campioni in base al trattamento. Ciò implica che la PCA, da sola, è inadeguata per la discriminazione. Tuttavia, l'implementazione della PCA con la CVA (Analisi delle Variabili Canoniche) ha migliorato la discriminazione tra i trattamenti. La CVA è una altra tecnica cosiddetta supervisionata che a differenza della PCA, utilizza informazioni di classe (ad esempio, i trattamenti di rifinizione della pelle nello studio) per trovare combinazioni lineari delle variabili originali che massimizzano la separazione tra le classi. I modelli costruiti hanno ottenuto un'accuratezza dell'85% per il modello FTIR e del 72% per il modello NIR nella convalida incrociata. In conclusione, lo studio conferma che l'applicazione combinata di spettroscopia IR e tecniche chemiometriche è un metodo promettente per caratterizzare i trattamenti di rifinizione della pelle, consentendo analisi più rapide e non distruttive per l'industria conciaria.

## BIBLIOGRAFIA

- Amigo, J. M., Cruz, J., Bautista, M., Maspoch, S., Coello, J., & Blanco, M. (2008). Study of pharmaceutical samples by NIR chemical-image and multivariate analysis. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 27(8), 696–713. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2008.05.010>
- Braz, C. E. M., Jacinto, M. a. C., Pereira-Filho, E. R., Souza, G. B., & Nogueira, A. R. A. (2018). Potential of near-infrared spectroscopy for quality evaluation of cattle leather. *Spectrochimica Acta Part a Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 202, 182–186. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2018.05.025>
- Cantero, R., Riba, J. R., Canals, T., Izquierdo, L. L., & Iturriaga, H. (2009). Characterisation of leather finishing by IR spectroscopy and canonical variate analysis. *Journal of the Society of Leather Technologists and Chemists*, 93(1), 12.
- Hetta, M., Mussadiq, Z., Wallsten, J., Halling, M., Swensson, C., & Geladi, P. (2017). Prediction of nutritive values, morphology and agronomic characteristics in forage maize using two applications of NIRS spectrometry. *Acta Agriculturae Scandinavica Section B - Soil & Plant Science*, 67(4), 326–333. <https://doi.org/10.1080/09064710.2017.1278782>
- Karoui, R., Mouazen, A. M., Dufour, É., Pillonel, L., Schaller, E., De Baerdemaeker, J., & Bosset, J. O. (2006). Chemical characterisation of European Emmental cheeses by near infrared spectroscopy using chemometric tools. *International Dairy Journal*, 16(10), 1211–1217.
- Naito, Y. I., Yamane, M., & Kitagawa, H. (2020). A protocol for using attenuated total reflection Fourier-transform infrared spectroscopy for pre-screening ancient bone collagen prior to radiocarbon dating. *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, 34(10). <https://doi.org/10.1002/rcm.8720>
- Sun, S. M., Guo, B. L., Wei, Y. M., & Fan, M. T. (2011). Application of near infrared spectral fingerprint technique in lamb meat origin traceability. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 31(4), 937–941.
- Swarbrick, B. (2014). The Current State of near Infrared Spectroscopy Application in the Pharmaceutical Industry. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 22(3), 153–156. <https://doi.org/10.1255/jnirs.1122>
- Vincent, B., & Dardenne, P. (2020). Application of NIR in agriculture. In *Springer eBooks* (pp. 331–345). [https://doi.org/10.1007/978-981-15-8648-4\\_14](https://doi.org/10.1007/978-981-15-8648-4_14)
- Vitale, R., Bevilacqua, M., Bucci, R., Magri, A. D., Magri, A. L., & Marini, F. (2012). A rapid and non-invasive method for authenticating the origin of pistachio samples by NIR spectroscopy and chemometrics. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 121, 90–99. <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2012.11.019>
- Woodcock, T., Downey, G., Kelly, J. D., & O'Donnell, C. (2007). Geographical Classification of Honey samples by Near-Infrared Spectroscopy: A Feasibility study. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 55(22), 9128–9134. <https://doi.org/10.1021/jf072010q>
- Woodcock, T., Downey, G., & O'Donnell, C. P. (2008). Confirmation of declared provenance of European extra virgin olive oil samples by NIR spectroscopy. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 56(23), 11520–11525. <https://doi.org/10.1021/jf802792d>
- Zheng, Y., Bai, J., Xu, J., Li, X., & Zhang, Y. (2017). A discrimination model in waste plastics sorting using NIR hyperspectral imaging system. *Waste Management*, 72, 87–98. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2017.10.015>