



**REPORT WEBINAR
9 LUGLIO 2025**

**Metodi chemiometrici e spettroscopia
NIR per il controllo della produzione
conciaria**

Dr. Antonio Medici

*Esperto in approcci di monitoraggio degli
impatti di processo conciario*

Programma di formazione e divulgazione scientifica 2025

Spettroscopia NIR

Durante il webinar è stato approfondito il potenziale della spettroscopia nel vicino infrarosso (NIR), integrata con metodi chemiometrici multivariati, come strumento strategico per una caratterizzazione rapida, non distruttiva ed efficiente dei materiali concitati.

Durante l'evento, è stato spiegato il funzionamento della spettroscopia NIR, che opera tra 780 e 2500 nm dove è possibile per rilevare legami tipici dei materiali organici come C-H, O-H e N-H. Sono state descritte brevemente le due modalità acquisizioni principali, trasmittanza per campioni liquidi o trasparenti e riflettanza diffusa per solidi opachi come il cuoio, e le differenti strumentazioni esistenti come gli spettrofotometri da banco e la strumentazione portatile come il Micronir-W utilizzato in questo studio. L'utilizzo della spettroscopia NIR nel settore conciario si distingue per la possibilità di effettuare misurazioni istantanee, senza danneggiare il campione e senza necessità di preparazione. Tali caratteristiche la rendono ideale per applicazioni di controllo qualità in linea o in laboratorio.

Approccio Chemiometrico

La seconda parte del webinar è stata dedicata alla chemiometria, ovvero l'insieme di tecniche statistiche e matematiche applicate all'analisi dei dati spettroscopici. È stato illustrato l'utilizzo della PCA (Principal Component Analysis), una tecnica che consente la riduzione dimensionale dei dati, l'identificazione di pattern nascosti, l'individuazione di outlier. La PCA permette di rappresentare i dati spettrali in uno spazio ridotto, utilizzando le componenti principali che contengono la maggior parte della varianza presente nei dati originali (Figura 1).

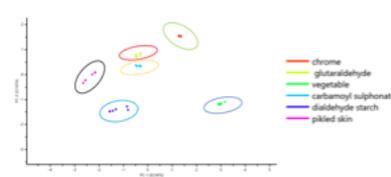


Figura 1 distribuzione spaziale di spettri NIR acquisiti su differenti campioni semilavorati con differenti conce

Successivamente è stato approfondito il metodo PLSR (Partial Least Squares Regression), che consente la costruzione di modelli predittivi in grado di correlare le informazioni spettrali con proprietà chimico-fisiche di interesse. Questo approccio è fondamentale per stimare parametri di processo e la composizione in tempo reale.

Il processo di validazione dei modelli è stato affrontato in dettaglio, spiegando l'importanza della cross-validation (sia leave-one-out che k-fold), della validazione esterna e del test set indipendente. Sono stati inoltre presentati gli indici chiave per la valutazione della bontà del modello, come R^2 , RMSEC e RMSEV.

Applicazioni e Risultati

Tra gli esempi applicativi presentati durante il webinar, sono stati mostrati i risultati della PCA applicata su differenti campioni di pelle conciati con differenti agenti, tra cui cromo, tannini vegetali, glutaraldeide, tannini sintetici. Questi campioni sono stati analizzati mediante spettroscopia NIR, con l'applicazione di pretrattamenti matematici come lo Standard Normal Variate (SNV) e la derivata seconda di Savitzky-Golay, per migliorare la qualità del segnale e ridurre gli effetti indesiderati legati allo scattering della luce.

L'analisi tramite PCA (Principal Component Analysis) ha permesso di esplorare la struttura dei dati e di verificare la capacità del sistema di differenziare i campioni sulla base del tipo di concia. In particolare, la PCA ha evidenziato una chiara divisione tra i differenti gruppi, indicando che le differenze spettrali associate ai diversi concianti sono sufficientemente marcate da consentire un raggruppamento anche con una tecnica non supervisionata quale la PCA.

Parallelamente, l'uso della PLSR (Partial Least Squares Regression) ha consentito lo sviluppo di modelli quantitativi, in grado di stimare la concentrazione dei concianti in fase acquosa. Questi modelli sono stati costruiti a partire da soluzioni standard preparate in laboratorio, in condizioni controllate, al fine di simulare il comportamento chimico durante la fase di concia vera e propria. I risultati ottenuti hanno mostrato un buon grado di accuratezza predittiva, dimostrando la potenzialità del metodo per applicazioni di controllo qualità in tempo reale.

A supporto dell'interpretazione dei modelli, sono stati mostrati grafici di score plot, utili per visualizzare la distribuzione dei campioni nello spazio delle componenti principali, e loading plot, impiegati per identificare le lunghezze d'onda più influenti nella predizione dei parametri chimici. Tali strumenti si sono rivelati fondamentali per la comprensione dei dati e per l'affinamento dei modelli analitici proposti.