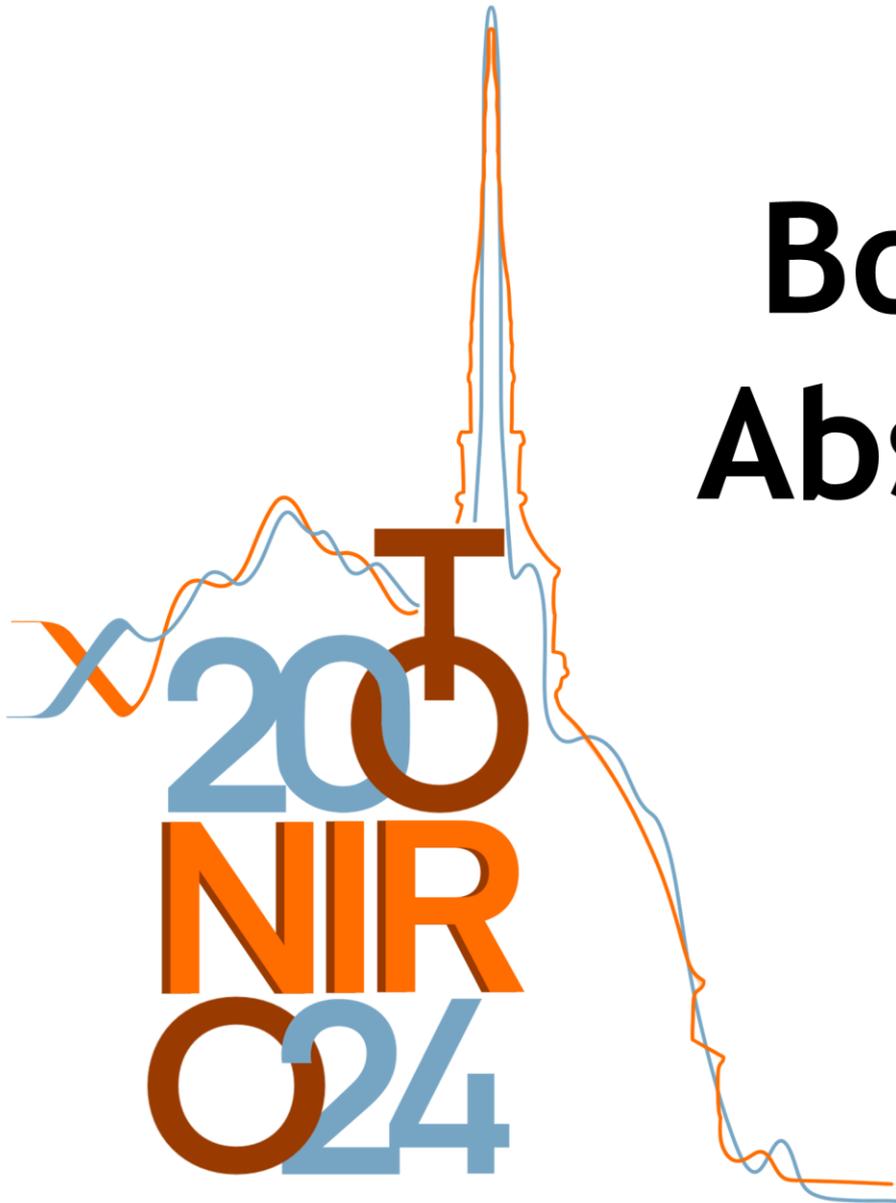


Simposio Nazionale NIR Italia 2024

Torino, 26-28 giugno

Book of Abstracts



Where the invisible matters

Book of Abstracts

Sommario

Messaggi di benvenuto	2
Programma del Simposio	5
Sponsor e patrocini	8
Pre-corsi	10
Abstract orali	11
Abstract poster	67

Messaggi di benvenuto

Benvenuti a NIR Italia 2024 da parte del Direttivo SISNIR

Gentili Soci, Colleghi ed Amici SISNIR,

è sempre un grande piacere aprire questo importante appuntamento per la nostra Società!

Come prima cosa vorrei ringraziare tutto il Comitato Organizzatore di NIR Italia 2024, in particolare il nostro collega Francesco Savorani e tutto il Suo gruppo di ricerca per l'eccellente lavoro svolto.

Vorrei ringraziare tutti Voi per essere presenti e ringraziare i relatori che interverranno in queste giornate, in particolare gli invited speaker Dott. Roberto Giangiacomo, Prof. Søren Balling Engelsen e Prof. Anna de Juan.

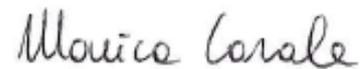
Un ringraziamento speciale va infine alle tante aziende che sostengono SISNIR e che hanno sponsorizzato questo evento: Bruker, Hellma, Metrohm, VIAVI, NIREOS, Buchi, Quantum Design con ITPhotonics, e Optoprim.

Sono molto felice di porgerVi, a nome di tutto il Direttivo e mio personale, un caloroso benvenuto, Vi auguriamo di trascorrere giornate ricche sotto tanti punti di vista.

In particolare, ci auguriamo che questo evento, grazie alle relazioni scientifiche e ai numerosi momenti di confronto, possa offrire validi spunti di discussione concorrendo al raggiungimento degli obiettivi della Società, ossia quelli della formazione e divulgazione scientifica.

Ci auguriamo inoltre di poter trascorre giornate piacevoli assieme in questa città ricca di storia e cultura e di condividere momenti di socialità che da sempre rendono il Simposio un "ritrovarsi in famiglia"!

Vi auguro un Buon NIR Italia 2024!



Monica Casale, *Presidente SISNIR*

Benvenuti a Torino da parte del Comitato Organizzatore

È con immenso piacere che vogliamo esprimere il nostro benvenuto a tutti i partecipanti del *X Simposio Nazionale di Spettroscopia NIR - NIR Italia 2024* - a Torino.

Da quel giorno di inizio giugno 2022 ad Izola (Slovenia), in cui abbiamo - un po' inconsapevolmente - accettato la sfida di organizzare il Simposio Nazionale della nostra comunità scientifica, il nostro obiettivo è sempre stato quello di rendere questo evento un'occasione speciale di incontro e scambio scientifico che valorizzasse tutte le sfaccettature di questa versatile spettroscopia, senza però trascurare minimamente l'aspetto sociale per rafforzare la collaborazione, l'amicizia e la scoperta reciproca dei molti gruppi di ricerca italiani, accademici ed industriali, che ne fanno uso in tanti modi diversi.

In questa edizione del Simposio, abbiamo il piacere di ospitare uno dei soci fondatori della Società Italiana di Spettroscopia NIR (SISNIR), il dott. Roberto Giangiacomo, che ci racconta le origini di quello che è oggi un gruppo vivace di ricercatori e ricercatrici, studenti e operatori aziendali, e che rappresenta la comunità dei soci SISNIR. Ma l'amicizia si estende anche oltre confine, ed è per questo che abbiamo voluto invitare due grandi esperti del settore, il prof. Søren B. Engelsen dell'Università di Copenhagen e la prof. Anna De Juan dell'Università di Barcellona. Sono loro i nostri prestigiosi Plenary speakers.

Altri autorevoli ospiti del mondo scientifico e industriale hanno accettato il nostro invito di presentare l'utilizzo della spettroscopia NIR in contesti reali e inconsueti; sono i nostri Invited Oral speakers.

L'edizione del Simposio Nazionale NIR Italia 2024, non sarebbe stata possibile senza il generoso supporto dei nostri numerosi Sponsor: Bruker, Hellma, Metrohm, VIAVI, NIREOS, Buchi, Quantum Design con ITPhotonics, e Optoprim, e con la collaborazione di Lavazza e Incoming Experience.

Allo stesso modo questo Simposio non sarebbe stato possibile senza la guida paziente e professionale del Comitato Direttivo di SISNIR, nelle persone di Monica, Cristina, Rosalba, Silvia e Federico.

Grazie a tutti Voi!

Infine, un grazie speciale va ai miei più stretti collaboratori (e dottorandi) che insieme a me hanno affrontato con passione questa avventura piena di sfide, in modo sempre positivo ed entusiasta: Alessandro, Eugenio, Gentian e Nicola fra i senior, e Caterina, Elena, Francesca e Mattia fra i dottorandi, in rigoroso ordine alfabetico e col patrocinio sia del Politecnico che dell'Università di Torino. Siete una squadra davvero speciale!

A tutti voi... un caloroso benvenuto a Torino. *Enjoy!*



Prof. Francesco Savorani, *Conference chair*

Comitati

Comitato organizzatore

Francesco Savorani (Politecnico di Torino) - *Conference Chair*

Nicola Cavallini (Politecnico di Torino) - *Webmaster & Graphic blacksmith*

Eugenio Alladio (Università di Torino)

Alessandro Giraudo (Politecnico di Torino)

Gentian Gavoci (Politecnico di Torino)

Elena Cazzaniga (Politecnico di Torino) - *Social media manager*

Mattia Sozzi (Politecnico di Torino) - *Webpadawan*

Caterina Celi (Politecnico di Torino)

Francesca Stella (Politecnico di Torino) - *Graphic designer & Autrice del logo*

Francesco Geobaldo (Politecnico di Torino)

Comitato scientifico

Francesco Savorani (Politecnico di Torino)

Monica Casale (Università degli Studi di Genova)

Rosalba Calvini (Università di Modena e Reggio Emilia)

Silvia Grassi (Università degli Studi di Milano)

Cristina Malegori (Università degli Studi di Genova)

Federico Marini (Università di Roma La Sapienza)

Alessandro Giraudo (Politecnico di Torino)

Nicola Cavallini (Politecnico di Torino)

Eugenio Alladio (Università di Torino)

Programma del Simposio

Mercoledì 26/06/24

09:00	Pre-corso 1	Dott. Cristina Malegori (Università degli Studi di Genova) <i>La spettroscopia NIR dalle basi</i>
11:00	Pre-corso 2	Prof. Anna de Juan (Università di Barcellona) <i>Problem-oriented NIR data processing: from the investigation of single spectra to process monitoring and imaging</i>
13:00		
13:30	Registrazione	Il desk per la registrazione si trova all'interno del Complesso Aldo Moro, davanti all'ingresso dell'auditorium. Qui vi verranno forniti il badge e la <i>Sacca della Conferenza™</i> .
14:30	Apertura lavori	Benvenuto ai partecipanti: - Prof. Francesco Savorani (Chair di NIRITALIA 2024) - Prof. Monica Casale (Presidente di SISNIR)
15:00	Plenary 1	Roberto Giangiacomo (Socio Fondatore SISNIR) <i>Nascita e sviluppo della Società Italiana di Spettroscopia NIR</i>
15:40	Sessione 1 Beni culturali Chairs: Marina Cocchi Alessio Tugnolo	O1: Anna Laura Tassi (Università degli Studi di Milano) <i>Caratterizzazione mediante spettroscopia NIR del supporto mesoporoso di silice MCM-41 dopo adsorbimento fisico e chimico di molecole di olio essenziale dell'albero del tè per lo sviluppo di un nuovo sistema di purificazione dell'aria</i>
16:00		O2: Giorgia Scitutto (Università di Bologna) <i>Imaging iperspettrale nel vicino infrarosso (NIR-HSI) per l'analisi non invasiva e sub-superficiale di dipinti e reperti archeologici</i>
16:20		Sponsor: Bruker <i>La spettroscopia vibrazionale dal micro al macro: come la tecnologia supporta ricerca, industria, sicurezza e ambiente</i>
16:35		 Coffee break + Poster session (25')
17:00	Sessione 2 Agro-alimentare I Chairs: Marina Cocchi Alessio Tugnolo	O3: Albert Kravos (InnoRenew CoE) <i>Il pretrattamento fisico della biomassa migliora la determinazione dell'idoneità delle foglie di olivo per la trasformazione in bioraffineria</i>
17:20		O4: Cesare Ravagli (Università di Bologna) <i>Sviluppo di curve di calibrazione per l'analisi NIR tramite utilizzo di un prototipo di camera di flusso, applicazione nell'industria alimentare degli oli vegetali</i>
17:40	Invited Oral 1 Lavazza	IO1: Raffaella Ceccarelli (Luigi Lavazza S.p.A.) <i>Applicazione dell'analisi NIR lungo il processo produttivo del caffè</i>
18:00	Degustazione caffè	Degustazione di uno <i>Specialty Coffee</i> di Lavazza Factory 1895.
18:20	Welcome cocktail 	Presso il Complesso Aldo Moro, un aperitivo di benvenuto con sottofondo musicale.
20:00		

Giovedì 27/06/24

09:00	Plenary 2	Søren Balling Engelsen (Università di Copenhagen) <i>Why nothing beats NIRS technology: The Green Analytical Choice for the Future Sustainable Food Production</i>
09:45	Sessione 3 PAT/Monitoraggio di processo <i>Chairs:</i> Paolo Berzaghi Lorenzo Strani	O5: Federico Cambiè (Paul Scherrer Institute) <i>Combinazione di spettroscopia NIR e chemiometria per la determinazione online della temperatura di processo</i>
10:05		O6: Francesca Sbolgi (Kode Solutions) <i>Spectralizer: un ponte tra spettroscopia e produzione</i>
10:25		O7: Irene Locatelli (Università degli Studi di Milano) <i>Monitoraggio e ottimizzazione del superchilling in prodotti carni</i>
10:45		Sponsor: Hellma HELLMA SOLUTIONS - Dalla consulenza applicativa allo sviluppo integrale di uno spettrometro custom per controllo di processo
11:00	Coffee break + Poster session (30')	
11:30	Sessione 4 Industriale <i>Chairs:</i> Paolo Berzaghi Lorenzo Strani	O8: Stefano Radice (Syensqo) <i>Spettroscopia Vibrazionale e tecnologie NIR per selezione polimeri</i>
11:50		O9: Chiara Cressoni (Centro Tessile Cottoniero e Abbigliamento S.p.A.) <i>Valutazione Preliminare dei Contaminanti nei Tessuti Post-consumo con Spettroscopia NIR accoppiata a Chemiometria</i>
12:10		O10: Emanuele Pizzano (Università di Bologna) <i>Spettroscopia NIR applicata nel campo degli Additivi Plastici (HALS) e dei Poliuretani</i>
12:30	Invited Oral 2 UNI	IO2: Elena Tamburini (Università di Ferrara / UNI - Ente italiano di normazione) <i>Le linee guida UNI per l'utilizzo della tecnica NIR nel settore agroalimentare: calibrazione quantitativa e qualitativa</i>
12:50	Pausa pranzo (60')	
13:50	Poster session (30')	
14:20	Sessione 5 Imaging <i>Chairs:</i> Giorgia Sciutto Danial Fatchurrahman	O11: Giacomo Squeo (Università degli Studi di Bari) <i>Applicazione della spettroscopia NIR per l'autenticità di prodotti carni da allevamento estensivo</i>
14:40		O12: Maria Luisa Amodio (Università degli Studi di Foggia) <i>Metodi non distruttivi per la predizione dei principali costituenti in frutti di pomodoro</i>
15:00		O13: Giulia Gorla (Universidad del Pais Vasco) <i>Trama e ordito delle immagini iperspettrali NIR: le sfide dei tessuti</i>
15:20	Sponsor: NIREOS TRICLOPS: un nuovo spettrometro a trasformata di Fourier a banda ultra larga	
15:35	Coffee break + Poster session (25')	
16:00	Assemblea SISNIR	Si terrà presso l'Auditorium del Complesso Aldo Moro.
17:00	Attività sociali	Tour 1 - <i>La Torino Reale</i> Tour 2 - <i>La Torino sul Fiume</i> Tour 3 - <i>All'ombra della Mole</i> Per tutti i tour partenza alle ore 17:00 dal Complesso Aldo Moro
19:30	Cena di Gala (con spostamento)	19:30 - Partenza in pullman da Piazza Vittorio Veneto Cena accompagnata dalla musica di The Kastars, con premiazione dei due migliori poster esposti. 00:00-02:00 - Rientro a Torino in pullman (Piazza Vittorio Veneto)
02:00		

Venerdì 28/06/24

09:30	Plenary 3	Anna de Juan (Università di Barcellona) <i>NIR imaging: digging into the power of spectral and spatial information</i>
10:15	Sessione 6 Agro-alimentare II	O14: Alessio Tugnolo (Università degli Studi di Milano) <i>Un sistema spettrale IoT per il monitoraggio della maturazione dell'uva: definizione di una strategia di rilevamento delle anomalie</i>
10:35		O15: Camilla Menozzi (Università di Modena e Reggio Emilia) <i>Spettroscopia FT-NIR e regressione PLS per monitorare il contenuto di etanolo e l'acidità totale durante la fermentazione del mosto di uve rosse: valutazione dell'efficacia di diversi intervalli spettrali</i>
10:55		O16: Lorenzo Strani (Università di Modena e Reggio Emilia) <i>Sviluppo di un metodo analitico basato su metodi spettroscopici non-distruttivi e chemiometria per la classificazione di mele di diversa origine</i>
11:15	Chairs: Ernestina Casiraghi Giacomo Squeo	Sponsor: Metrohm Good Vibes with OMNIS NIR
11:30	 Coffee break + Poster session (30')	
12:00	Sessione 7 Chemiometria e Intelligenza Artificiale	O17: Sara Gariglio (Università degli Studi di Genova) <i>Le potenzialità della spettroscopia NIR in chimica forense: la datazione delle macchie di sangue</i>
12:20		O18: Lorenzo Serva (Università di Padova) <i>Selezione di variabile per la valutazione della qualità della fibra negli alimenti per bovini</i>
12:40		O19: Eugenio Alladio (Università di Torino / DataBloom S.r.l.) <i>SpectrApp: una dashboard open-source per l'analisi (chemiometrica) di dati spettroscopici</i>
13:00	Chairs: Marco Calderisi Zelan Li	Sponsor: VIAVI Soluzioni NIR Portatili: Dallo Smartphone al Cloud
13:15	 Pausa pranzo (60')	
14:15	Invited Oral 3 EUCLID	IO3: Stefano Dusini (INFN), Marco Scodreggio (INAF IASF) <i>La missione spaziale Euclid e lo strumento NISP</i>
14:45	Sessione 8 Strumentazione portatile	O20: Claudia Gambale (CREA-ZA) <i>Confronto delle prestazioni di quattro spettrometri NIR portatili nell'analisi di foraggi</i>
15:05		O21: Viviana Cavallaro (CREA-IT) <i>Analisi dei macronutrienti del latte utilizzando diversi NIR portatili</i>
15:25		O22: Rossella Abbate (Agroscope / Università degli Studi di Milano) <i>Sviluppo di un sistema micro-NIRS-app-cloud per la determinazione in loco della composizione nutrizionale dei mangimi avicoli e dei suoi vari ingredienti</i>
15:45	Chiusura	Chiusura dei lavori e arrivederci a NIRITALIA 2026 (dove?)
16:30		

Sponsor e patrocini

Sponsor Gold:



Sponsor Silver:



Sponsor Bronze:



NIR Italia 2024 ha il patrocinio di:



**Politecnico
di Torino**



**UNIVERSITÀ
DI TORINO**

È promosso da:

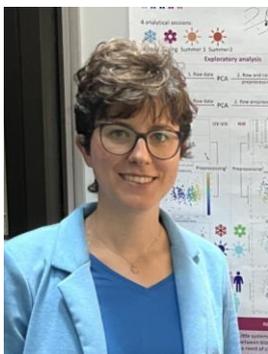


Ospita:



Pre-corsi

Pre-corso 1: La spettroscopia NIR dalle basi



Docente: Dott. Cristina Malegori

Il presente corso ha come obiettivo la trattazione della spettroscopia NIR come tecnica analitica non distruttiva applicata in svariati ambiti.

Dopo rapidi cenni storici, l'attenzione verrà posta sulle caratteristiche proprie della tecnica NIR e le differenze che presenta, da un punto di vista tecnico e applicativo, rispetto alle spettroscopie MIR e Raman. Sarà dedicato tempo alla descrizione delle metodiche di acquisizione (trasmissione, riflessione, transflessione) nonché alle modalità di presentazione del campione (solido, liquido, polveri). A seguire saranno presentate le modalità di lavoro dei più comuni spettrofotometri sia da banco che portatili, fornendo indicazioni su vantaggi e limitazioni delle diverse strumentazioni.

La docente utilizzerà esempi applicativi reali in differenti ambiti di ricerca per sottolineare l'importanza degli aspetti descritti, evidenziando i punti cruciali (a volte sottovalutati) per una buona riuscita dell'analisi.

Pre-corso 2: Problem-oriented NIR data processing: from the investigation of single spectra to process monitoring and imaging



Docente: Prof. Anna de Juan

Questo corso non è pensato per essere un seminario avanzato di chemiometria, ma una descrizione qualitativa su come trattare i dati NIR in vari scenari: dall'uso di singoli spettri per campione a scopi di calibrazione, esplorazione o classificazione, allo studio di serie di misurazioni NIR per la comprensione, la modellazione e il controllo dei processi.

Infine, verrà presentata la misurazione con imaging NIR, concentrandosi sui vantaggi legati all'uso simultaneo delle informazioni spaziali e spettrali.

This course is not meant to be a hardcore chemometric seminar, but a qualitative description on how to deal with NIR data in multiple scenarios: from using single spectra per sample for calibration, exploration or classification purposes to study series of NIR measurements for process understanding, modeling and control. Finally, the NIR imaging measurement will be presented, focusing on the advantages related to the simultaneous use of spatial and spectral information.

Elenco orali

Plenary 1 - Roberto Giangiacomo

Plenary 2 - Søren Balling Engelsen

Plenary 3 - Anna de Juan

I01 - Raffaella Ceccarelli (*Lavazza*)

I02 - Elena Tamburini (*UNI*)

I03 - Stefano Dusini e Marco Scodreggio (*Euclid*)

O1 - Anna Laura Tassi

O2 - Giorgia Sciutto

O3 - Albert Kravos

O4 - Cesare Ravagli

O5 - Federico Cambiè

O6 - Francesca Sbolgi

O7 - Irene Locatelli

O8 - Stefano Radice

O9 - Chiara Cressoni

O10 - Emanuele Pizzano

O11 - Giacomo Squeo

O12 - Maria Luisa Amodio

O13 - Giulia Gorla

O14 - Alessio Tugnolo

O15 - Camilla Menozzi

O16 - Lorenzo Strani

O17 - Sara Gariglio

O18 - Lorenzo Serva

O19 - Eugenio Alladio

O20 - Claudia Gambale

O21 - Viviana Cavallaro

O22 - Rossella Abbate

Plenary 1: Nascita e sviluppo della Società Italiana di Spettroscopia NIR

Roberto Giangiacomo

Socio onorario SISNIR, via G. Da Milano, 4, Milano, rob.giangiacomo@gmail.com



Questo contributo racconta la genesi della Società Italiana di Spettroscopia NIR a venti anni dalla sua nascita, come e perché è stata costituita e come si è sviluppata.

Si racconta di una lunga gestazione per lo sviluppo dell'idea, partendo da una Conference in Canada nel 1995 dove si sono incontrati la prima volta due di coloro che poi porteranno, molti anni dopo, alla costituzione della Società. Partendo dalla considerazione della scarsissima presenza di ricercatori italiani in un contesto internazionale in questo campo, si maturò l'ipotesi di trovare mezzi e finanziamenti per aiutare a formare dei giovani capaci di confrontarsi con il mondo della spettroscopia internazionale.

Il primo passo per raggiungere questo scopo era raccogliere coloro che in settori diversi utilizzavano questa tecnica. Quindi si organizzò a Siena un Simposio cui parteciparono Centri di ricerca, Università, aziende pubbliche e private. Su questa base venne lanciata la candidatura dell'Italia per l'organizzazione della 9^a International Conference on NIR Spectroscopy.

Il cerchio cominciò ad allargarsi finché fu possibile organizzare un secondo Simposio nazionale a Lodi al termine del quale venne proposta la costituzione della Società Italiana di Spettroscopia NIR dando mandato ad un piccolo nucleo di procedere ai passi formali necessari alla costituzione della Società.

Il 27 settembre del 2004 in uno studio notarile venne costituito il "COMITATO ITALIANO DI SPETTROSCOPIA NIR", il quale con l'emanazione dello Statuto formalizzò il 13 dicembre 2006 la conversione del Comitato in Società. Negli anni successivi SISNIR fu in grado di finanziare la partecipazione di giovani a Conferenze internazionali, stage presso centri di ricerca stranieri, abbonarsi alla rivista *JNIRS* in modo che tutti i soci potessero richiedere bibliografia di loro interesse specifico, e promuovere l'organizzazione di giornate di studio su temi particolari.

Parole chiave: SISNIR, squadra, successi, storia

Plenary 1: Genesis and development of the Italian Society of NIR Spectroscopy

This contribution tells the story of the genesis of the Italian Society of NIR Spectroscopy twenty years after its establishment, how and why it was formed, and how it has developed.

It recounts a long gestation period for the development of the idea, starting from a conference in Canada in 1995 where two of those who would later contribute to the establishment of the Society first met. Beginning with the observation of the very limited presence of Italian researchers in an international context in this field, the hypothesis was formed to find means and funding to help train young people capable of engaging with the world of international spectroscopy.

The first step to achieve this goal was to gather those who in different sectors used this technique. Thus, a Symposium was organized in Siena, attended by research centres, universities, public and private companies. On this basis, Italy submitted its candidacy to host the 9th International Conference on NIR Spectroscopy.

The circle began to widen until it was possible to organize a second national Symposium in Lodi, at the end of which the establishment of the Italian Society of NIR Spectroscopy was proposed, entrusting a small nucleus to proceed with the formal steps necessary for its constitution.

On September 27, 2004, in a notary's office, the "ITALIAN COMMITTEE OF NIR SPECTROSCOPY" was established, which formalized the conversion of the Committee into a Society on December 13, 2006, with the issuance of its Statute. In the following years, SISNIR was able to finance the participation of young people in international conferences, internships at foreign research centres, subscribe to the *JNIRS* magazine so that all members could request bibliography of their specific interest, and promote the organization of study days on particular topics.

Keywords: SISNIR, team, successes, history

Plenary 2: Why nothing beats NIRS technology: The Green Analytical Choice for the Future Sustainable Food Production

Søren Balling Engelsen

Food Analytics and Biotechnology, University of Copenhagen, Rolighedsvej 26, 1958 Frederiksberg C (Denmark), se@food.ku.dk



Here I argue for the fact that near infrared technology due to its unique properties will become an indispensable green sensor technology in the future digitalized and sustainable food production.

Ongoing advancements in NIRS technology, coupled with increased accessibility and integration with advanced multivariate data analysis such as machine learning and artificial intelligence will further amplify NIRS's impact across food, agricultural, environmental, and renewable energy domains.

The miniaturization, increased portability, and enhanced affordability of NIR instruments, coupled with its integration into emerging technologies, will empower a diverse range of industries and researchers to address pressing global challenges with unprecedented precision and efficiency.

The implementation of near infrared technology in process analytical technology will enable the transition to a future digitalized and sustainable food production. In a future circular economy, where waste streams, co-products and water are reclaimed and valorized, continuous measurements are necessary and in many cases, there are no sensor alternatives to near infrared technology.

Plenary 3: NIR image analysis: exploiting spatial information and image fusion opportunities

Anna de Juan¹, Adrián Gómez-Sánchez^{1,2} and Rodrigo Rocha de Oliveira¹

¹ Chemometrics group, Universitat de Barcelona (Spain), anna.dejuan@ub.edu

² LASIRE. Université de Lille (France)



NIR imaging joins the versatility of NIR spectroscopy with the spatial description provided by the imaging measurement. This combination is generally useful in the description of complex samples and becomes mandatory for process understanding when the joint interpretation of spatiochemical changes defines the system evolution and the characteristics of end-products. Blending processes are the paradigm of transformations where both chemical and spatial information should be necessarily taken into account. In this context, the fast measurement of NIR pushbroom imaging systems is particularly suitable for discrete and continuous process monitoring. Combining properly the measurement with unmixing analysis techniques will allow understanding the evolution of the blending process at a global and specific compound level, offering the possibility to detect end-points and to quantitatively characterize in real-time the heterogeneity of the blended material (de Oliveira et al., 2020; de Oliveira et al., 2021).

Another asset of NIR imaging when compared with other imaging platforms is the possibility to scan large sample areas in a short time. The drawback is that the spectroscopic features and the spatial resolution attained tend to be worse than for other platforms, such as Raman imaging. In this context, image fusion appears as the perfect solution to obtain the best characteristics of the individual images combined. Solving the multiscale problems linked to differences in spatial resolution and area scanned in image fusion is a challenge, but a recent modification of the unmixing algorithm Multivariate Curve Resolution-Alternating Least Squares (MCR-ALS) opens a wealth of possibilities to exploit all available information of fused imaging platforms despite the natural differences among the individual measurements combined (Gómez-Sánchez et al., 2024).

Keywords: NIR imaging, process monitoring, image fusion, chemometrics, unmixing analysis.

References:

- de Oliveira, R., de Juan, A., 2020. Design of heterogeneity indices for blending quality assessment based on hyperspectral images and variographic analysis. *Analytical Chemistry*, 92(24), 15880-15889.
- de Oliveira, R. R., & de Juan, A., 2021. SWiVIA-Sliding window variographic image analysis for real-time assessment of heterogeneity indices in blending processes monitored with hyperspectral imaging. *Analytica Chimica Acta*, 1180, 338852.
- Gómez-Sánchez, A., Ruckebusch, C., Tauler, R., de Juan, A., 2024. Dealing with missing data blocks in Multivariate Curve Resolution. Towards a general framework based on a single factorization model. *Trends in Analytical Chemistry*, submitted.

IO1: Applicazione dell'analisi NIR lungo il processo produttivo del caffè

Raffaela Ceccarelli, Carlotta Caruso, Stefania Zecchi, Cristiano Portis, Alberto Cabilli

Luigi Lavazza SpA - Stabilimento 1895, Via S. Daniele 36, Settimo T.se (TO),
raffaela.ceccarelli@lavazza.com

Il caffè è una delle bevande in assoluto più consumate al mondo, e nell'ultimo mezzo secolo in Italia ha acquisito un'importanza quasi identitaria. Per quanto sia convinzione diffusa che il caffè sia una bevanda piuttosto semplice sia per quanto riguarda la sua preparazione sia per quanto riguarda la sua varietà, il processo produttivo del caffè implica una serie di passaggi legati alla trasformazione del prodotto, come la scelta del crudo, la tostatura, la macinazione e il confezionamento. Questi sono soltanto gli aspetti più importanti e macroscopici che lo rendono un alimento dall'apparenza semplice ma ad alta complessità tecnica.

Nell'ambito del monitoraggio della produzione del caffè si possono trovare in letteratura diversi studi, e risultano particolarmente interessanti quelli incentrati sull'utilizzo della spettroscopia NIR (Adnan et al., 2017; Santos et al., 2016). L'esperienza di Lavazza sull'utilizzo del NIR nasce dallo studio degli Specialty Coffee (Tolessa et al., 2016) presso lo stabilimento di 1895, per poi allargarsi a differenti ambiti applicativi lungo tutta la filiera produttiva. Si descriverà quindi come il NIR supporta la produzione giornaliera del caffè di Lavazza, assieme ad alcune applicazioni future verso le quali sono in corso studi per poter consentire di ottenere una produzione il più possibile in linea con le nostre aspirazioni.

Parole chiave: caffè, monitoraggio di processo, analisi at-line, analisi chemiometrica.

Ringraziamenti: Lavazza ringrazia Riccardo Leardi, Emanuele Farinini, la start-up DataBloom e le università di UniTO, PoliTO e UniMI per le attive collaborazioni.

IO1: Application of NIR analysis during coffee production process

Coffee is one of the most consumed drinks in the world, and in the last half century it has acquired in Italy an identifying importance. Although it is widely believed that coffee is a rather simple drink both in terms of preparation and variety, coffee production process involves a series of steps linked to the product transformation, such as the choice of raw coffee, roasting, grinding and packaging. These are only the most important and macroscopic aspects, that make it a food with a simple appearance but a high technical complexity.

Various studies can be found in the literature linked to coffee production monitoring, and those focusing on the use of NIR spectroscopy are particularly interesting (Adnan et al., 2017; Santos et al., 2016). Lavazza's experience in the use of NIR was born in 1895 plant during the study of Specialty Coffee (Tolessa et al., 2016) and then expanded to different applications along the entire production chain. We will then describe how NIR supports the daily production of Lavazza coffee, together with some future applications towards which studies are underway to allow us to obtain a production as much as possible in line with our aspirations.

Keywords: coffee, process monitoring, at-line analysis, chemometrics analysis.

Acknowledgements: Lavazza thanks Riccardo Leardi, Emanuele Farinini, DataBloom start-up and University of UniTO, PoliTO e UniMI for active collaborations.

Riferimenti:

- Adnan, A., von Hörsten, D., Pawelzik, E. and Mörlein, D., 2017. Rapid prediction of moisture content in intact green coffee beans using near infrared spectroscopy. *Foods*, 6(5), p.38.
- Santos, J.R., Viegas, O., Páscoa, R.N., Ferreira, I.M., Rangel, A.O. and Lopes, J.A., 2016. In-line monitoring of the coffee roasting process with near infrared spectroscopy: Measurement of sucrose and colour. *Food Chemistry*, 208, pp.103-110.
- Tolessa, K., Rademaker, M., De Baets, B. and Boeckx, P., 2016. Prediction of specialty coffee cup quality based on near infrared spectra of green coffee beans. *Talanta*, 150, pp.367-374.

IO2: Le linee guida UNI per l'utilizzo della tecnica NIR nel settore agroalimentare: calibrazione quantitativa e qualitativa

Cristina Alamprese¹, Roberto Beghi², Rosalba Calvini³, Valentina Giovenzana², Silvia Grassi¹, Cristina Malegori⁴, Andrea Revello Chion⁵, Nicoletta Rizzi, Elena Tamburini⁶

¹ Dipartimento di Scienze per gli Alimenti, la Nutrizione e l'Ambiente, Università di Milano

² Dipartimento di Scienze Agrarie e Ambientali, Università di Milano

³ Dipartimento di Scienze della Vita, Università di Modena e Reggio Emilia

⁴ Dipartimento di Farmacia, Università di Genova

⁵ ARA Lombardia

⁶ Dipartimento di Scienze dell'Ambiente e della Prevenzione, Università di Ferrara, tme@unife.it

La necessità di avere linee guida univoche per l'intero settore agro-alimentare e non di singola filiera è nata dall'esigenza di uniformare il più possibile le procedure analitiche nell'applicazione della tecnica NIR. Sollecitazioni in questo senso sono emerse a diversi livelli, in particolare da parte di diverse categorie di utilizzatori della tecnologia, che hanno sempre lamentato la difficoltà a dare evidenza riconosciuta all'impiego della tecnica come strumento di controllo di prodotto e di processo, mancando un riferimento ufficiale del metodo. Nel 2020, all'interno dell'Ente italiano di normazione UNI, si è costituito un gruppo di lavoro composto da rappresentanti del mondo della ricerca pubblica (Università, altre Istituzioni) e privata (laboratori interni grandi imprese, laboratori di prova) e fornitori di strumentazione, con lo scopo proprio di definire e standardizzare le operazioni di, taratura, controllo e allineamento strumentale. Inoltre, viste le diverse e variegate caratteristiche tecniche degli strumenti attualmente disponibili sul mercato e le diverse potenzialità di elaborazione dei dati, una procedura uniforme e condivisa sulle modalità di campionamento, i requisiti della misura e le caratteristiche dell'acquisizione dei segnali è apparsa quanto mai necessaria e attuale.

Il lavoro svolto dal gruppo ha portato in 4 anni alla stesura e approvazione di due norme tecniche che forniscono le linee guida per l'utilizzo della tecnica NIR per la determinazione di parametri analitici di campioni, materiali e prodotti del settore agroalimentare destinati all'alimentazione umana e animale con calibrazione quantitativa (UNI/TS 11892:2022) e qualitativa (UNI/TS 11942:2024).

Entrambe le norme riportano in modo univoco indicazioni per un campionamento efficace, lo sviluppo e la valutazione dei modelli predittivi, e la loro applicazione per la stima di parametri quantitativi o qualitativi, in base alla norma utilizzata. Attraverso esempi applicativi si è inoltre cercato di fornire all'utilizzatore, anche non esperto, uno strumento per ottimizzare l'uso della tecnica attraverso una sequenza ragionata e standardizzata di operazioni.

Parole chiave: linea guida, spettroscopia NIR, UNI, calibrazione quantitativa, calibrazione qualitativa

Ringraziamenti: Gli autori ringraziano Roberto Giangiacomo, tutto è nato da una sua idea, Tiziana MP Cattaneo, per l'appoggio a distanza, e Barbara Pignataro (UNI) per il costante e attento supporto in tutte le fasi della stesura delle linee guida.

IO2: UNI guidelines for the use of NIR in the agri-food sector: quantitative and qualitative calibration

The need for clear guidelines for the agro-food sector as a whole, rather than for individual supply chain, arose from the need to standardise, as far as possible, analytical procedures in the use of NIR. This has been emphasised at various levels, in particular by the different categories of users of the technology, who have always complained about the difficulty of providing recognised evidence of the use of the technique as a tool for product and process control in the absence of an official reference for the method. In 2020, a working group was set up within UNI, the Italian body of standardized guidelines, composed of representatives from the public research world (universities, other institutions) and the private world (internal laboratories of large companies, test laboratories), as well as instrument suppliers, with the aim of defining and standardising the calibration, control and adjustment operations of instruments. In addition, given the different and diverse technical characteristics of the instruments currently available on the market and the different data processing capabilities, a uniform and common procedure for sampling arrangements, measurement requirements and signal acquisition characteristics seemed more necessary and topical than ever.

The work of the group has led to the drafting and approval, over a period of 4 years, of two technical standards that provide guidelines for the use of the NIR technique for the determination of analytical parameters of samples, materials and products of the agro-food sector intended for human and animal consumption, with quantitative (UNI/TS 11892:2022) and qualitative (UNI/TS 11942:2024) calibration.

Both standards provide clear guidance on effective sampling, the development and evaluation of predictive models and their application for the estimation of quantitative or qualitative parameters based on the standard used. The aim was to provide the user, even not an expert, with a tool to optimize the use of the technique through a reasoned and standardized sequence of operations.

Keywords: guidelines, NIR spectroscopy, UNI, quantitative calibration, qualitative calibration

Acknowledgements: the authors sincerely acknowledge Roberto Giangiacomo, everything was born from his idea, Tiziana MP Cattaneo, for her permanent remote support and Barbara Pignataro (UNI) for her tireless and constant helping in writing and editing both the guidelines.

IO3: La missione spaziale Euclid e lo strumento NISP

Stefano Dusini¹, Marco Scoddeggio²

¹ Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN) sezione di Padova, via Marzolo 8, 35131 Padova, Italia,
stefano.dusini@pd.infn.it

² Istituto di Astrofisica Spaziale e Fisica cosmica Milano (INAF-IASF) Milano, Via Alfonso Corti 12, 20133
 Milano, Italia, marco.scoddeggio@inaf.it

Parte 1: La missione spaziale Euclid e lo strumento NISP (S. Dusini)

Lo studio dell'espansione dell'Universo rappresenta una delle sfide più affascinanti della moderna cosmologia. Le osservazioni fino ad ora fatte ci dicono che l'attuale Universo è composto per il 95% da forme di energia e materia, chiamate energia oscura e materia oscura, la cui natura ci è ignota, ma i cui effetti dominano l'attuale evoluzione dell'Universo su larga scala. Per far luce su questo "lato oscuro" dell'Universo nel luglio 2023 l'European Space Agency (ESA) ha lanciato la missione spaziale Euclid con l'obiettivo di misurare con estrema accuratezza l'evoluzione dell'Universo e delle strutture a larga scala per comprendere la natura dell'energia oscura e capire se questa sia dovuta a una nuova forza o a un comportamento differente della gravità su scala cosmica. Per raggiungere questo obiettivo il telescopio spaziale Euclid osserverà circa 14000 gradi quadrati di cielo extra-galattico per costruire il più grande catalogo di galassie fino ad ora realizzato. Il catalogo conterrà la posizione angolare di miliardi di galassie osservate sia nella banda del visibile, attraverso lo strumento VIS, che in quella del vicino infrarosso mediante lo strumento NISP. Quest'ultimo è uno spettrofotometro sensibile nella regione 0.92-2.2 μm (920-2200 nm), che attraverso le misure fotometriche in tre bande e la ricostruzione degli spettri di emissione delle galassie, consentirà di misurare la distanza delle galassie grazie al redshift cosmologico. Dopo una breve presentazione degli obiettivi scientifici della missione, l'intervento si concentrerà sulla descrizione dello strumento NISP e sulle sfide tecnologiche per la sua realizzazione.

Parte 2: La survey spettroscopica di Euclid con lo strumento NISP (M. Scoddeggio)

La survey spettroscopica rappresenta una delle due attività scientifiche principali del satellite Euclid. La combinazione dell'evoluzione globale del nostro Universo con l'effetto introdotto dalla sua espansione (lo spostamento verso il rosso dell'emissione luminosa delle galassie lontane) rende molto importante poter osservare gli spettri delle galassie nella loro parte infrarossa, per poter osservare direttamente gli effetti dell'attività di formazione stellare, e costruire allo stesso tempo mappe estremamente accurate della distribuzione tri-dimensionale delle galassie stesse. L'analisi ancora preliminare dei primi dieci milioni di spettri ottenuti fino ad ora ci consente di misurare quantitativamente la qualità dei dati spettroscopici prodotti da Euclid, e predire la precisione delle sue misure future.

Parole chiave: Missione Euclid, telescopio spaziale, cielo extragalattico, redshift cosmologico, spettrofotometro, analisi spettroscopica

IO3: The Euclid Space Mission and the NISP Instrument

Part 1: The Euclid Space Mission and the NISP Instrument (S. Dusini)

The study of the expansion of the Universe represents one of the most fascinating challenges of modern cosmology. Observations made so far tell us that the current Universe is composed of 95% forms of energy and matter, called dark energy and dark matter, whose nature is unknown to us, but whose effects dominate the current large-scale evolution of the Universe. To shed light on this 'dark side' of the Universe, in July 2023 the European Space Agency (ESA) launched the Euclid space mission with the aim of accurately measuring the evolution of the Universe and large-scale structures to understand the nature of dark energy and determine whether it is due to a new force or a different behavior of gravity on a cosmic scale. To achieve this goal, the Euclid space telescope will observe about 14,000 square degrees of extragalactic sky to build the largest catalog of galaxies ever made. The catalog will contain the angular position of billions of galaxies observed in both the visible band, through the VIS instrument, and the near-infrared band using the NISP instrument. The latter is a spectrophotometer sensitive in the 0.92-2.2 μm (920-2200 nm) range, which, through photometric measurements in three bands and the reconstruction of the emission spectra of galaxies, will allow the measurement of galaxy distances thanks to cosmological redshift. After a brief presentation of the mission's scientific objectives, the talk will focus on the description of the NISP instrument and the technological challenges for its realization.

Part 2: The Euclid spectroscopic survey with the NISP instrument (M. Scodreggio)

The spectroscopic survey represents one of the two main scientific activities of the Euclid satellite. The combination of the global evolution of our Universe with the effect introduced by its expansion (the redshift of the light emission from distant galaxies) makes it very important to observe the spectra of galaxies in their infrared part, to directly observe the effects of star formation activity, and at the same time build extremely accurate maps of the three-dimensional distribution of the galaxies themselves. The preliminary analysis of the first ten million spectra obtained so far allows us to quantitatively measure the quality of the spectroscopic data produced by Euclid, and to predict the precision of its future measurements

Keywords: Euclid mission, space telescope, extragalactic sky, cosmological redshift, spectrophotometer, spectroscopic analysis

01: Caratterizzazione mediante spettroscopia NIR del supporto mesoporoso di silice MCM-41 dopo adsorbimento fisico e chimico di molecole di olio essenziale dell'albero del tè per lo sviluppo di un nuovo sistema di purificazione dell'aria

Anna Laura Tassi, Alessia Santiglia, Laura Santagostini, Vittoria Guglielmi, Paola Fermo

Università di Milano, Dipartimento di Chimica, Via Camillo Golgi 19, annalaura.tassi@unimi.it

L'olio essenziale dell'albero del tè è il principale estratto delle foglie dell'albero *Melaleuca Alternifolia* e possiede un'incredibile attività antimicotica e antibatterica, grazie al componente principale terpinene-4-olo.

Questo lavoro si inserisce nell'ambito della conservazione del patrimonio culturale e tratta il problema della presenza di spore fungine e batteri presenti nell'aria che tendono a depositarsi e a degradare le superfici artistiche. Sfruttando le eccezionali proprietà antimicotiche e antibatteriche dell'olio essenziale, è possibile eliminare gli organismi che causano il degrado (Daisey et al., 2003).

Per evitare interazioni indesiderate tra l'olio dell'albero del tè e il materiale artistico e per ovviare all'alta volatilità tipica degli oli essenziali, l'agente battericida e fungicida è stato adsorbito e legato chimicamente sulla superficie di un supporto mesoporoso di silice, ovvero le microparticelle MCM-41 (Vallet-Regi et al., 2003).

Naturalmente l'attività dell'olio essenziale, che sia o meno legato alla silice, dipende fortemente dalla sua composizione, per cui è importante disporre di opportuni metodi di analisi chimica. Generalmente, l'identificazione delle sostanze fenoliche e terpeniche presenti nell'olio essenziale avviene mediante tecniche gascromatografiche (Al-Maharik et al., 2024). Questi metodi richiedono normalmente tempi di misura piuttosto lunghi oltre ad essere dispendiosi. In questa ricerca si propone un approccio basato sull'applicazione della spettroscopia NIR, ottenendo una semplificazione del protocollo analitico. Difatti, la maggior parte delle sostanze a base di oli essenziali presenta bande chiave significative e ben risolte che possono essere utilizzate per la caratterizzazione degli olii in modo rapido ed efficace (Schulz et al., 2003). Inoltre, anche il supporto scelto, cioè le microparticelle di MCM-41, sono state studiate nella regione NIR dove si trovano le bande armoniche e di combinazione dei modi fondamentali dei gruppi OH superficiali.

In particolare, ci si è concentrati sulla variazione delle frequenze di banda NIR osservata sia per quanto riguarda il supporto di silice che l'olio essenziale una volta che esso venga adsorbito o legato chimicamente alla superficie della silice.

Parole chiave: MCM-41, tea tree, air quality, funghi, bacteria

O1: Characterization through NIR spectroscopy of silica mesoporous support MCM-41 after physical adsorption and crafting of tea tree essential oil molecules for a new air cleaning system development

Tea tree essential oil is the main extract of the leaves of the tree *Melaleuca Alternifolia* and it has an incredible antifungal and antibacterial activity, mainly due to its main component terpinene-4-ol. This work relates with the conservation of cultural heritage and specifically with the presence of fungal spores and bacteria in the air that settle-down and biodegrade works of art. Thanks to the exceptional antifungal and antibacterial properties of the essential oil, it is possible to kill the organisms that cause the degradation (Daisey et al., 2003).

To avoid unwanted interactions between tea tree oil and the surfaces and to overcome the typical high volatility of essential oils, the bactericidal and fungicidal agent has been adsorbed and chemically bonded on a silica mesoporous support, i.e. MCM-41 microparticles (Vallet-Regi et al., 2003). Obviously, the activity of the essential oil, whether or not it is linked to silica, strongly depends on its composition, so it is important to apply appropriate chemical analysis methods.

Generally, the identification of phenolic and terpenic substances present in the essential oil extracted from plants is carried out using gas chromatographic techniques (Al-Maharik et al., 2024). These methods normally require rather long measurement times as well as being rather expensive. In this research we propose an approach based on the application of NIR spectroscopy, which leads to a simplification of the analytical protocol. In fact, most essential oil substances have significant and well-resolved key bands that can be used to characterize oils quickly and effectively (Schulz et al., 2003). Furthermore, the chosen support, i.e. MCM-41 microparticles, were studied in the NIR region where the harmonic and combination bands of the fundamental modes of the surface OH groups are located. We focused on the variation in NIR band frequencies observed both regarding the silica support and the essential oil once it is adsorbed or chemically bound to the silica surface.

Keywords: MCM-41, tea tree, air quality, fungi, bacteria

Riferimenti

- Vallet-Regi, M., Rámila, A., Del Real, R.P. and Pérez-Pariente, J., 2001. A new property of MCM-41: drug delivery system. *Chemistry of Materials*, 13(2), pp.308-311.
- Al-Maharik, N., Salama, Y., Al-Hajj, N., Jaradat, N., Jobran, N.T., Warad, I., Hamdan, L., Alrob, M.A., Sawafta, A. and Hidmi, A., 2024. Chemical composition, anticancer, antimicrobial activity of *Aloysia citriodora* Palau essential oils from four different locations in Palestine. *BMC Complementary Medicine and Therapies*, 24(1), p.94.
- Schulz, H., Quilitzsch, R. and Krüger, H., 2003. Rapid evaluation and quantitative analysis of thyme, origano and chamomile essential oils by ATR-IR and NIR spectroscopy. *Journal of Molecular Structure*, 661, pp.299-306.
- Daisey, J.M., Angell, W.J. and Apte, M.G., 2003. Indoor air quality, ventilation and health symptoms in schools: an analysis of existing information. *Indoor air*, 13(1).

O2: Imaging iperspettrale nel vicino infrarosso (NIR-HSI) per l'analisi non invasiva e sub-superficiale di dipinti e reperti archeologici

Giorgia Sciotto¹, Emilio Catelli¹, Cristina Malegori², Zelan Li¹, Silvia Prati¹, Sahra Talamo³, Lucrezia Gatti¹, Michele Occhipinti⁴, Alessandro Tocchio⁴, Rocco Mazzeo¹, Paolo Oliveri²

¹ University of Bologna, Department of Chemistry "G. Ciamician", Ravenna Campus, Via Guaccimanni, 42, 48121, Ravenna, Italy, giorgia.sciutto@unibo.it

² University of Genova, Department of Pharmacy, Viale Cembrano 4, I-16148, Genova, Italy

³ Department of Chemistry G. Ciamician, Alma Mater Studiorum, University of Bologna Via Selmi 2, Bologna, 40126, Italy

⁴ XGLab SRL - Bruker Nano Analytics, Via Conte Rosso 23, I-20134 Milano, Italy

Negli ultimi decenni, l'impiego di sistemi di imaging iperspettrale nel vicino infrarosso (NIR-HSI) come strumento diagnostico nell'ambito della scienza per la conservazione ha suscitato un crescente interesse, grazie al ridotto costo ed al carattere non invasivo delle analisi. Nelle applicazioni di riflessione su campioni solidi, la spettroscopia NIR è considerata una tecnica analitica di superficie; tuttavia, è stato dimostrato che la radiazione NIR può penetrare sotto la superficie del campione in misura significativa, a seconda di vari fattori. Tale proprietà permette lo sviluppo di nuove strategie analitiche non invasive in grado di ottenere informazioni stratigrafiche da opere d'arte dipinte (che di solito presentano una struttura stratificata) o da reperti archeologici, rilevando la presenza interna di frazioni organiche.

Il presente contributo riporta i recenti sviluppi di strategie di NIR-HSI per la caratterizzazione non invasiva di strutture multistrato di opere policrome, tramite applicazione di un sistema multimodale di HSI che permette la registrazione simultanea di dati in diverse regioni spettrali (VNIR, SWIR e XRF) in combinazione con l'elaborazione multivariata dei dati, al fine di ottenere informazioni elementari e molecolari dagli strati superficiali a quelli sub-superficiali.

Inoltre, le potenzialità di un sistema di NIR-HSI sono state sfruttate per costruire un modello di regressione multivariata al fine della predizione del contenuto e della distribuzione del collagene in ossa antiche. L'approccio si è dimostrato efficace come strumento di pre-screening per selezionare le aree con il più alto contenuto di collagene da campionare per ulteriori indagini micro-distruttive, come la datazione al radiocarbonio.

Parole chiave: imaging iperspettrale, beni culturali, chemiometria

02: Near Infrared hyperspectral imaging systems for in-depth non-invasive investigation of paintings and archeological remains

In the last decades, near-infrared hyperspectral imaging (NIR-HSI) systems have gained increasing interest as a diagnostic tool for the study of artworks, thanks to some attractive advantages offered by the approach, such as the reduced costs of instrumentation, high rapidity, and the possibility of performing measurements in a non-invasive way, obtaining information on the spatial distribution of components. In most of reflection applications on solid samples, NIR spectroscopy is considered as a surface analytical technique, although it has been demonstrated that NIR radiation may penetrate under sample surface to a significant extent depending on several factors, gaining the possibility to perform in-depth characterization of artworks materials. This may address one of the main issues in investigation of cultural heritage, related to the development of new non-invasive analytical strategies able to obtain stratigraphic information from painted artworks (which usually present a layered structure) or in archaeological remains, to explore the inner presence of preserved organic fractions.

Within this scenario, this contribution relies on the recent advanced strategies in NIR-HSI for the non-invasive characterization of multi-layered artworks and for the pre-screening of archaeological bones. Concerning the first topic, the co-recording of VNIR, SWIR, and XRF spectral data simultaneously is exploited in combination with an innovative multivariate and multiblock high-throughput data processing for the analysis of multi-layered paintings, to obtain elemental and molecular information from superficial to subsurface layers across the investigated area.

For the second application, an NIR-HSI camera was employed to build a multivariate regression model for the prediction of collagen content and distribution in ancient bones. This method proved to be effective as a pre-screening tool to select the areas with the highest collagen content to be sampled for further micro-destructive investigations, such as radiocarbon dating.

Keywords: hyperspectral imaging, cultural heritage, chemometrics

Riferimenti:

- Catelli, E., Li, Z., Sciutto, G., Oliveri, P., Prati, S., Occhipinti, M., Tocchio, A., Alberti, R., Frizzi, T., Malegori, C. and Mazzeo, R., 2023. Towards the non-destructive analysis of multilayered samples: A novel XRF-VNIR-SWIR hyperspectral imaging system combined with multiblock data processing. *Analytica Chimica Acta*, 1239, p.340710.
- Malegori, C., Sciutto, G., Oliveri, P., Prati, S., Gatti, L., Catelli, E., Benazzi, S., Cercatillo, S., Paleček, D., Mazzeo, R. and Talamo, S., 2023. Near-infrared hyperspectral imaging to map collagen content in prehistoric bones for radiocarbon dating. *Communications Chemistry*, 6(1), p.54.

O3: Il pretrattamento fisico della biomassa migliora la determinazione dell'idoneità delle foglie di olivo per la trasformazione in bioraffineria

Albert Kravos¹, Jakub Sandak²

¹ InnoRenew CoE, Livade 6A, 6310 Izola, Slovenia, albert.kravos@innorenew.eu

² University of Primorska, Andrej Marušič Institute, Muzejski trg 2, 6000 Koper

L'umidità, l'eterogeneità e l'anisotropia della biomassa possono influenzare notevolmente l'accuratezza e la precisione della sua valutazione spettroscopica. In questo studio è stata indagato l'effetto del pretrattamento fisico della biomassa sulla previsione della sua composizione chimica. L'esperimento ha incluso tre trattamenti preliminari applicati alle foglie di olivo (FO) prima dell'analisi spettroscopica: nessun trattamento, essiccazione ed essiccazione seguita da macinazione. L'obiettivo era stabilire un protocollo di misurazione NIR che garantisse una maggiore robustezza dei modelli chemiometrici. Le bioraffinerie hanno identificato come rilevanti le previsioni dei contenuti di oleuropeina, acido oleanolico, polifenoli totali, triterpeni totali, polifenoli simili alla luteolina e all'apigenina. I risultati mostrano che le foglie non trattate presentano incertezze analitiche significative a causa dell'alto contenuto di umidità ed una scarsa correlazione tra dati spettroscopici e quelli di riferimento, e ciò rende i modelli basati su queste misurazioni poco affidabili, poiché la concentrazione degli estrattivi cambia con l'essiccazione. È stato osservato un miglioramento nella capacità di previsione nei campioni essiccati; la riduzione del contenuto di umidità ha facilitato l'interazione della luce infrarossa con i gruppi funzionali, precedentemente occlusi dall'acqua. I coefficienti di correlazione nei modelli chemiometrici sono modestamente migliorati. Nonostante le misurazioni siano state effettuate in vari punti della foglia, questi modelli mancano ancora di robustezza, mostrando che l'essiccazione da sola non è sufficiente a eliminare tutti i fattori di interferenza. Combinando l'essiccazione e la macinazione ha prodotto una polvere omogenea che migliora notevolmente la copertura del sensore NIR e la robustezza dei modelli chemiometrici. Questi ultimi hanno dimostrato un'alta affidabilità e robustezza, evidenziando forti capacità predittive. I risultati sottolineano l'importanza di pretrattamenti adeguati nell'analisi spettroscopica, identificando l'essiccazione e la macinazione come passaggi cruciali per ottenere risultati accurati e affidabili su campioni biologici. Questi processi, sebbene richiedano tempo, possono essere integrati nei protocolli standard delle bioraffinerie, migliorando l'efficienza e la precisione degli esiti analitici.

Parole chiave: analisi chemiometrica, foglie di olivo, robustezza analitica

Ringraziamenti: La Commissione Europea è riconosciuta per il finanziamento del progetto InnoRenew (sovvenzione n. 739574 nell'ambito di Horizon2020 Widespread-2-Teaming), e la Repubblica di Slovenia e il Fondo Europeo di Sviluppo Regionale. Il progetto OLEAF4VALUE ha ricevuto finanziamenti dal BioBased Industries Joint Undertaking (JU) sotto l'accordo n. 101023256. Il JU riceve supporto da Horizon 2020 dell'Unione Europea e dal Bio Based Industries Consortium. Un ringraziamento esteso ai progetti ARIS N4-0274 DENDRO-SPEC e N1-0223 per i loro contributi.

O3: Physical Preprocessing of Biomass Improves Determination of the Olive Leaves Suitability for the Biorefinery Transformation

Moisture content, heterogeneity and anisotropy of the biomass can drastically affect the accuracy and precision of its spectroscopic assessment. Therefore, an impact of the biomass' physical pretreatment on the accuracy of its chemical composition prediction is investigated in this study. Our experimental design included three distinct preprocessing treatments that were applied to the olive leaves (OL) before spectral analysis. These included no treatment, drying, and drying followed by grinding. The objective was to define an optimal NIR measurement protocol assuring enhanced robustness of derived chemometric models. Biorefineries identified the following predictions to be the most relevant: content of oleuropein, oleanolic acid, total polyphenols, total triterpenes, Luteolin-like polyphenols and Apigenin-like polyphenols. The results from untreated OL revealed substantial analytical uncertainty, due to the high moisture content of fresh biomass. The poor correlation between spectroscopic data and reference data makes the chemometric models derived from these measurements the least reliable, especially because the concentration of extractives changes when drying of biomass. Some improvement of the prediction capacity was observed in samples that were only dried before measurement. The reduction in moisture content facilitated the interaction of infrared light with the functional groups previously covered by water molecules. The correlation coefficients in the resulting chemometric models were modestly improved. Despite measurements being taken at various points on the leaf, these models still lack robustness, indicating that drying alone is considered as insufficient to eliminate all interfering factors. Combining drying and grinding resulted in a homogeneous powder, which also properly covers the opening of the NIR sensor. The chemometric models developed from such spectra revealed highest reliability and robustness, demonstrating strong predictive capabilities. These results underscore the necessity for appropriate pretreatments in spectroscopic analyses of plant materials, identifying drying and grinding as essential steps to achieve accurate and reliable results from infrared spectroscopy. Despite being time-consuming, these steps can be integrated into routine biorefinery protocols.

Keywords: chemometric analysis, olive leaves, analytical robustness,

Acknowledgements: The European Commission is acknowledged for funding the InnoRenew project (grant agreement #739574 under the Horizon2020 Widespread-2-Teaming program), and the Republic of Slovenia Republic of Slovenia and the European Regional Development Fund). The project OLEAF4VALUE has received funding from the Bio Based Industries Joint Undertaking (JU) under grant agreement No 101023256. The JU receives support from the European Union's Horizon 2020 research and innovation program and the Bio Based Industries Consortium. Extending acknowledgement to the ARIS projects N4-0274 DENDRO-SPEC and N1-0223 for their contributions.

O4: Sviluppo di Curve di calibrazione per l'analisi NIR tramite utilizzo di un prototipo di camera di flusso, applicazione nell'industria alimentare degli oli vegetali

Cesare Ravagli¹, Szimonetta Toth², Marya Solomonova², Katalin Recseg² Maria Fiorenza Caboni¹

¹ Dipartimento di Scienze e tecnologie agro-alimentari, Università di Bologna Piazza Goidanich 60, 47521 Cesena (FC) cesare.ravagli2@unibo.it

² Bunge zrt. Martfű, 5435 Hungary

Le analisi dello spettro infrarosso (NIR) coprono, oggi, la maggior parte delle analisi non distruttive nei settori industriali. Nell'industria degli oli vegetali raffinati, le analisi NIR sono storicamente utilizzate per velocizzare e innovare le analisi tradizionali di base, come l'acidità libera e il valore perossido (PV) (Cozzolino, 2012). In questo genere di analisi ai fini di ottenere modelli di previsione accurati, sono necessari valori affidabili dei parametri stimati, sulla base dei quali costruire sistemi predittivi, ed una elevata standardizzazione delle analisi, la quale garantisce il minimo errore standard operativo. Nel presente lavoro l'obiettivo è stato quello di sviluppare ulteriormente l'analisi NIR degli oli vegetali raffinati mediante l'uso di un prototipo di camera a flusso fornito da Buchi Italia s.r.l. Il prototipo consente l'analisi degli oli vegetali in un'operazione automatizzata, in cui si elimina l'intervento umano nel carico e scarico del campione diminuendo la possibilità di insurrezione di errori umani. I campioni analizzati erano vari oli vegetali freschi, tra cui oli di girasole, oli di girasole ad alto contenuto di acido oleico, oli di mais, oli di soia e oli di arachidi, conservati immediatamente dopo il processo di raffinazione, ai fini di garantire la minor contaminazione possibile, per un totale di 120 campioni analizzati. Le curve elaborate hanno coperto una vasta gamma di parametri fisici e chimici, come: acidità libera, colore rosso e giallo, percentuali di acidi grassi, in particolare C18:0, C18:1, C18:2, C18:3, C20:0, C20:1, C22:0 e C22:1. I dati ottenuti sono stati elaborati su un ProxiMate™ (BUCHI Italia s.r.l., Italia) e sul suo software integrato. Dai dati ottenuti, sono state ottenute curve di calibrazione con R² che vanno da 0,95 a 0,999 per ciascun parametro considerato, confermando la stabilità di analisi del prototipo e la sua implementazione nei laboratori.

Parole chiave: oli vegetali, analisi NIR, curve di calibrazione, prototipo strumentale

Ringraziamenti: Si ringrazia BUCHI Italia per il materiale tecnico fornito per lo studio, nonché per il supporto ricevuto in fase di elaborazione dati. Vengono ringraziate inoltre Cristina Di Cori e Monica Ritani per il prezioso supporto fornito.

O4: Developing of NIR calibration curves using a flux chamber innovative prototype, applications on the food industry, vegetable oils

Near Infra-Red (NIR) analyses cover, now days, most sectors, and industries. NIR analyses consist in operative procedures that, with the appropriate modelling, constitutes rapid, innovative, and non-destructive analyses in the food industry. Regarding the refined vegetable oils industry, the NIR analyses have been historically used to speed and innovate core traditional analyses such as free acidity and peroxide value (PV) (Cozzolino, 2012). To enable accurate prediction models, reliable values of the estimated parameters are required, and a high standardization of the NIR analyses ensures the minimum operational standard error. In the present work the aim was to further develop the NIR analysis of refined vegetable oils by means of use of a flux chamber prototype provided by Buchi Italy. The prototype enables the analysis of vegetable oils in an automatized operation, by contrast of today's analyses, in which an operator is often required to manually charge and discharge the sample analysed, creating biases and means of human error. The analysed samples were fresh various vegetable oils, including sunflower oil, high oleic sunflower oil, corn oil, soy oil and peanut oil, stored immediately after the refining process, for a total amount of 120 samples analysed. The curves elaborated covered a wide range of both physical and chemical parameters, such as: Free acidity, red colour, yellow colour, fatty acids percentages, specifically C18:0, C18:1, C18:2, C18:3, C20:0, C20:1, C22:0 and C22:1. The data obtained were elaborated on a Proxi-Mate™ (BUCHI Italia s.r.l., Italy) and it's in built software. From the data obtained, calibration curves with R2 ranging from 0.95 to 0.999 were obtained for each parameter considered, assessing the stability of the prototype and its feasibility for laboratory implementation.

Keywords: vegetable oils, NIR analysis, calibration curves, instrumental prototype

Acknowledgments: We would like to personally thanks BUCHI Italy for the technical materials given to the study, and also for the support on the data elaboration. Another thank Is also given to Cristina Di Cori e Monica Ritani for their precious support.

Riferimenti:

Cozzolino, D., 2012. Recent trends on the use of infrared spectroscopy to trace and authenticate natural and agricultural food products. *Applied Spectroscopy Reviews*, 47(7), pp.518-530.

05: Combinazione di spettroscopia NIR e chemiometria per la determinazione online della temperatura di processo

Federico Cambiè^{1,2}, Ivo Alxneit¹, Davide Ferri¹

¹ Paul Scherrer Institute, Forschungsstrasse 111, CH-5232 Villigen PSI (Switzerland),
federico.cambiè@psi.ch

² École polytechnique fédérale de Lausanne (EPFL), Institute for Chemical Sciences and Engineering, CH-1015 Lausanne (Switzerland)

La spettroscopia NIR (near infrared spectroscopy) è un metodo analitico ampiamente utilizzato nel monitoraggio di processi chimico-fisici. La combinazione con metodi chemiometrici è necessaria per catturare ed evidenziare cambiamenti spettrali altrimenti impercettibili ad una prima ispezione visiva (Næs, 2004; Siesler et al., 2001). Spostamenti batocromici, ipsochromici o allargamenti di banda possono verificarsi a causa di variazioni di temperatura e pressione. Pertanto, è possibile correlare questi cambiamenti spettrali a variazioni di proprietà chimico-fisiche, come ad esempio variazioni di temperatura (Renati et al., 2019).

In questo studio ci siamo concentrati sul comportamento dell'acqua da condizioni ambiente fino a elevata temperatura e pressione in un reattore chiuso, contenente una sonda a trasmissione collegata tramite fibre ottiche ad uno spettrometro NIR. Gli spettri sono stati acquisiti continuamente ogni 30 secondi durante una rampa di temperatura. Il nostro obiettivo era anche quello di stabilire una procedura di analisi definita per dati spettrali, dalla visualizzazione degli spettri fino allo sviluppo di modelli per la previsione di proprietà di processo, come ad esempio la temperatura. In particolare, inizialmente abbiamo effettuato un'indagine esplorativa degli spettri tramite PCA. Lo score plot di PC1 e PC2, che ha spiegato il 90.7% dell'informazione totale contenuta negli spettri, ha permesso di modellare qualitativamente la temperatura, suggerendo come PC1 codifichi la temperatura stessa. Inoltre, abbiamo associato lo spostamento batocromo dei picchi a PC2. Il metodo di regressione PLS è stato poi utilizzato per sviluppare un modello quantitativo da utilizzare come sensore di temperatura online in un reattore chiuso in condizioni di alta temperatura e pressione. Successivamente, abbiamo confrontato il modello PLS con diversi algoritmi di machine learning (come kNN, SVM e XGBoost) per valutare possibili miglioramenti nell'accuratezza della previsione.

Nel complesso, il nostro studio sottolinea l'utilità della spettroscopia NIR accoppiata alla chemiometria nel chiarire complessi processi chimico-fisici ed evidenzia l'efficacia di varie tecniche di modellizzazione per la previsione di parametri di processo critici.

Parole chiave: sensore, temperatura, monitoraggio online, analisi delle componenti principali (PCA), metodo di regressione dei minimi quadrati parziali (PLS), machine learning.

Ringraziamenti: Gli autori ringraziano per il finanziamento ricevuto da Innosuisse e Casale SA.

05: Combining NIR spectroscopy and chemometrics for the online determination of process temperature

Near-infrared (NIR) spectroscopy is a widely utilized analytical method for online monitoring of chemical processes. Combination with chemometrics methods is necessary to capture and highlight changes in spectra occurring during chemo-physical processes that are otherwise imperceptible by eye inspection (Næs, 2004; Siesler et al., 2001). Batho- and hypsochromic shifts, as well as peaks broadening, may occur due to variations in process temperature and pressure. Therefore, it is possible to analyze these spectral changes and correlate them with chemo-physical properties such as temperature variation (Renati et al., 2019).

In this study, we focused on the spectral behavior of water from ambient conditions to elevated temperature and pressure in a closed reactor in which an immersion transmission probe was installed and connected to the NIR spectrometer through fiber optics. Spectra were continuously acquired every 30 s during a temperature ramp. We aimed also to establish a well-defined workflow for spectral data, from visualization to the development of quantification models for predicting chemo-physical process properties, such as temperature. Specifically, we employed Principal Component Analysis (PCA) for data exploration and pattern recognition. The score plot of PC1 versus PC2 (explaining 90.7% of the total variance in the spectral data) enabled us to obtain a qualitative model of temperature, suggesting how temperature was encoded by PC1. Furthermore, we associated peak blue-shifts as encoded in PC2. Then, we utilized Partial Least Squares (PLS) regression to develop a quantitative model to be used as an online temperature sensor in a closed reactor under elevated temperature and pressure conditions. Finally, we compared the PLS model with different machine learning modeling approaches (such as kNN, SVM, and XGBoost) to assess potential improvement in prediction accuracy.

Overall, our study underscores the utility of the combination of NIR spectroscopy and chemometrics in elucidating complex chemo-physical processes and highlights the effectiveness of various modeling techniques in predicting critical process parameters.

Keywords: temperature, sensor, online monitoring, Principal Component Analysis (PCA), Partial Least Squares regression (PLS), machine learning.

Acknowledgements: the authors gratefully acknowledge receiving funding from Innosuisse and Casale SA.

Riferimenti:

- Næs, T., Isaksson, T., Fearn, T. and Davies, T., 2002. A user-friendly guide to multivariate calibration and classification. Chichester, UK: NIR.
- Renati, P., Kovacs, Z., De Ninno, A. and Tsenkova, R., 2019. Temperature dependence analysis of the NIR spectra of liquid water confirms the existence of two phases, one of which is in a coherent state. *Journal of Molecular Liquids*, 292, p.111449.
- Siesler, H.W., Ozaki, Y., Kawata, S. and Heise, H.M. eds., 2008. Near-infrared spectroscopy: principles, instruments, applications. John Wiley & Sons.

O6: SpectralizeR: un ponte tra spettroscopia e produzione

Marco Calderisi*, Ilaria Ceppa, Francesca Sbolgi, Andrea Spinelli

Kode Solutions - Lungarno Galilei 1, 56125, Pisa, Italy, *m.calderisi@kode-solutions.net

SpectralizeR è un software per l'analisi di dati spettrali derivanti da diverse tecniche, tra cui NIR, XRF, Raman, Fluorescenza. Diversamente da altri software che si concentrano su singoli aspetti, SpectralizeR nasce con l'obiettivo di creare un punto di contatto tra le analisi spettroscopiche applicate in contesti industriali ed il processo produttivo stesso. La fusione di questi due sistemi offre una visione completa della produzione, permettendo di superare i limiti di approcci separati, che non sfruttano appieno il potenziale reciproco di una banca dati unificata. A differenza di soluzioni chiuse con sonde e relativi software proprietari, SpectralizeR è capace di connettersi con sonde di produttori diversi, garantendo compatibilità e libertà di scelta. Allo stesso modo, si collega facilmente con le varie fonti dati dei sistemi gestionali (OPC-UA, DCS, database SQL/NoSQL, API, cartelle remote in FTP/SFTP), estraendo le informazioni chiave per ottenere una visione completa e dettagliata del processo.

Il core computazionale, basato su R, esegue l'analisi spettrale, il preprocessing dei dati, la creazione di modelli di Applicability Domain e Calibrazione. Inoltre, integra le informazioni spettrali con i dati di processo per implementare modelli di root cause analysis e supporto decisionale, ottimizzando il processo e correggendo eventuali derive produttive. Le analisi sono accessibili tramite una web app che, tramite un'interfaccia grafica moderna e user-friendly, permette la selezione e la creazione di modelli, visualizzando in tempo reale gli spettri e i valori stimati per l'ultimo campione analizzato. L'architettura del sistema si basa su microservizi Docker, utilizzando il framework proprietario Princess per il controllo accessi e la sicurezza (Princess Security Service) e l'accesso alle fonti dati (Princess Data Storage).

Al momento SpectralizeR è in uso presso un'azienda che opera nel settore agronomico per monitorare in real time il contenuto di umidità delle diverse tipologie di prodotto in più stadi del processo produttivo.

Parole chiave: software, calibrazione, monitoraggio di processo, modelli predittivi

O6: SpectralizeR: a bridge between spectroscopy and production

SpectralizeR is a software for the analysis of spectral data derived from different techniques, including NIR, XRF, Raman, Fluorescence. Unlike other software that focuses on a single side of the analysis, SpectralizeR was created with the aim of creating a point of contact between spectroscopic analyses applied in industrial contexts and the production process itself. The fusion of these two systems offers a complete vision of production, making it possible to overcome the limitations of segregated approaches, which do not fully exploit the reciprocal potential of a unified database. Unlike closed solutions with probes and related proprietary software, SpectralizeR is capable of connecting with probes from different manufacturers, ensuring compatibility and freedom of choice. Likewise, it easily connects with the various data sources of management systems (OPC-UA, DCS, SQL/NoSQL databases, API, remote folders in FTP/SFTP), extracting key information to obtain a complete and detailed view of the process.

The computational core, based on R, performs spectral analysis, data preprocessing, Applicability Domain and Calibration modeling. Furthermore, it integrates spectral information with process data to implement root cause analysis models and decision support, optimizing the process and correcting any production derivatives. The analyzes are accessible via a web app which, through a modern and user-friendly graphic interface, allows the selection and creation of models, displaying the spectra and estimated values for the last analyzed sample in real time. The system architecture is based on Docker microservices, using the Princess proprietary framework for access control and security (Princess Security Service) and access to data sources (Princess Data Storage).

SpectralizeR is currently in use by a company that operates in the agronomic sector to monitor in real time the moisture content of different types of products at multiple stages of the production process.

Keywords: software, calibration, process monitoring, predictive modeling

Riferimenti:

- R Core Team, 2021. R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. <https://www.R-project.org/>
- Stevens, A. and Ramirez-Lopez, L., 2014. An introduction to the prospectr package. R package Vignette R package version 0.2.7.
- Burns, D.A. and Ciurczak, E.W. eds., 2007. Handbook of near-infrared analysis. CRC press. 3rd Edition, CRC Press

07: Monitoraggio e ottimizzazione del superchilling in prodotti carnei

Irene Locatelli, Silvia Grassi

Dipartimento di Scienze per gli Alimenti, la Nutrizione e l'Ambiente, Università degli Studi di Milano, via G. Celoria 2, 20133 Milan, Italy, irene.locatelli@unimi.it

La catena del freddo svolge un ruolo cruciale nella conservazione e nel trasporto degli alimenti deperibili, garantendo qualità e sicurezza per i consumatori (Ndraha et al., 2018). La sua ottimizzazione può significativamente ridurre lo spreco e promuovere la sicurezza degli alimenti in modo sostenibile. In questo contesto, il processo di *superchilling* offre vantaggi lungo l'intera catena del freddo (Magnussen et al., 2008).

Il presente studio si propone di ottimizzare il processo di *superchilling* dei prodotti carnei attraverso l'implementazione *on-line* della spettroscopia NIR come strumento di *Process Analytical Technology* per il monitoraggio della cristallizzazione del ghiaccio.

Sei cubi di lonza di maiale sono stati monitorati, utilizzando un MicroNIR (Viavi Solutions, USA) e un sensore di temperatura (Elitech GSP-6, UK), durante il trattamento con aria a -18°C a 1.3 m/s. La PCA, condotta sugli spettri NIR, ha rivelato un pattern di distribuzione degli *score* in accordo con la curva teorica di congelamento, confermato dai relativi *loading*. Carte di controllo multivariate, basate sugli *score* di PC1, sono state calibrate considerando quattro prove di congelamento, e, successivamente validate con due prove indipendenti. L'inizio e la fine della fase di transizione sono stati determinati mediante ΔPC1 tra due tempi di campionamento consecutivi.

I risultati ottenuti evidenziano il potenziale della spettroscopia NIR per monitorare e ottimizzare il processo di *superchilling*, permettendo un controllo più preciso della formazione di cristalli di ghiaccio e riducendone gli effetti dannosi sui prodotti carnei.

Parole chiave: superchilling, prodotti carnei, carte di controllo multivariate, NIR portatile

Ringraziamenti: Irene Locatelli ha presentato domanda per una borsa di studi attraverso "Grant per la partecipazione al X Simposio Nazionale di Spettroscopia NIR" stanziato da SISNIR.

07: Enhancing SuperChilling Efficiency in Meat Processing

The cold chain plays a crucial role in preserving and transporting perishable food, ensuring quality and safety (Ndraha et al., 2018). Its optimisation can significantly reduce waste and promote food safety in a sustainable manner. In this context, the superchilling process offers benefits throughout the entire cold chain (Magnussen et al., 2008).

This study aims at optimising the superchilling process of meat products through the on-line implementation of NIR spectroscopy as a Process Analytical Technology tool. The main objective is to validate the use of NIR spectroscopy for the continuous monitoring of ice crystallisation during superchilling treatment by means of multivariate control charts.

Six pork loin cubes were monitored, using a MicroNIR (Viavi Solutions, USA) and a temperature probe (Elitech GSP-6, UK), during treatment with air at -18°C at 1.3 m/s. PCA, conducted on the NIR spectra, revealed a score distribution pattern in agreement with the theoretical freezing curve, which was confirmed by the related loadings. Multivariate control charts, based on PCA scores, were calibrated considering four freezing tests, and subsequently validated with two independent tests. The initial and final point of the transition phase were determined by ΔPC1 between two consecutive samplings.

The obtained results highlight the potential of NIR spectroscopy as an effective tool to monitor and optimise the *superchilling* process, thus, allowing more precise control of ice crystal formation and reducing its detrimental effects on meat products.

Keywords: superchilling, meat products, multivariate control charts, portable NIR

Acknowledgements: Irene Locatelli applied for a “Grant for participation in the X National Symposium on NIR Spectroscopy” awarded by SISNIR.

Riferimenti:

Magnussen, O.M., Haugland, A., Hemmingsen, A.K.T., Johansen, S. and Nordtvedt, T.S., 2008. Advances in superchilling of food-Process characteristics and product quality. *Trends in Food Science & Technology*, 19(8), pp.418-424.

Mercier, S., Villeneuve, S., Mondor, M. and Uysal, I., 2017. Time-temperature management along the food cold chain: A review of recent developments. *Comprehensive reviews in food science and food safety*, 16(4), pp.647-667.

O8: Spettroscopia Vibrazionale e tecnologie NIR per selezione polimeri

Stefano Radice¹, Domenico Ferrari¹, Stefano Millefanti¹, Marco Gregori²

¹ Syensqo, Viale Lombardia 20, Bollate (MI) Italy, stefano.radice@syensqo.com

² Tomra Sorting GmbH, Otto-Hahn-Strasse 2-6, Mulheim Karlich, Germany

Gli aspetti legati alla sostenibilità nell'industria dei polimeri e nella società stanno assumendo sempre più importanza. La possibilità di realizzare una economica circolare, dove i prodotti chimici e manufatti possano essere riutilizzati o generare nuove materie prime per nuove produzioni, è lo scopo primario. Una delle sfide che pone questa visione è la capacità di identificare e selezionare i diversi materiali a partire dai rifiuti municipali raccolti o dopo la raccolta differenziata nel caso delle plastiche. Fra le tecnologie più utilizzate da impianti commerciali vi sono le Spettroscopie (prevalentemente NIR), immagine iperspettrale (a volte con l'ausilio di "machine learning" ed intelligenza artificiale - Greyparrot weblink). La spettroscopia NIR è uno strumento potente per la classificazione e la separazione dei materiali polimerici da diverso tempo (Sustar et al., 2014). In realtà alcuni dei materiali più complessi o alcuni prodotti finiti devono ancora essere opportunamente classificati. In questo studio prendiamo in considerazione materiali polimerici che contengono PVDC (polivinilidencloruro); si tratta di multistrato la cui principale applicazione è nel "food packaging". Abbiamo studiato questi sistemi ed i polimeri di riferimento mediante la Spettroscopia Vibrazionale (IR e Raman), allo scopo di individuare e descrivere i modi normali di vibrazione; gli aspetti caratteristici dovuti alla presenza dello strato di PVDC vengono discussi, considerando i parametri frequenza e intensità (Gussoni, 1986); dati spettroscopici NIR sono stati registrati e discussi. Specifici assorbimenti nello spettro NIR dovuti a overtones e bande di combinazione sono stati individuati. Utilizzando un apparato industriale/commerciale di TOMRA (Tomra weblink), è stato possibile costruire una libreria di dati specifica. Il test in campo ha dimostrato la possibilità di identificare queste strutture multistrato complesse e di individuare la presenza di PVDC. Questo studio apre nuove possibilità nella separazione dei flussi di materiali plastici raccolti, con più elevata sensibilità e accuratezza.

Parole chiave: Polivinilidenecloruro (PVDC), film multistrato, selezione polimeri, spettroscopia vibrazionale.

O8: Vibrational Spectroscopy and NIR technology for Polymer sorting

The sustainability aspects in the polymer industry and in the society are becoming more and more important. The possibility to reach a circular economy, where chemicals and products after use may be used again and provide raw materials for further goods production constitutes an important target. One of the challenges in this process is the sorting of the materials starting from the Municipal Solid Waste (MSW) or after the collection of separated plastics waste. Most of the technology used so far in the commercial equipment for plastic sorting makes use of Spectroscopy (mainly NIR Spectroscopy), hyperspectral imaging (with the use of technology like machine learning and new AI approaches - Greyparrot weblink). NIR spectroscopy is a powerful tool in the classification and sorting of polymeric materials since many years (Sustar et al., 2014); actually some of the most complex materials or end products still need to be classified. In this study we report results obtained for PVDC (polyvinylidenechloride) containing polymeric materials; they are multilayer (ML) films with main applications in the food industry. We studied the ML systems and the standard polymers constituting the ML with Vibrational Spectroscopy (IR and Raman), to locate and describe the fundamental normal modes. The features characteristic due to the presence of PVDC layer have been identified and discussed, considering both frequency and intensity parameters (Gussoni, 1986); NIR data have been recorded and discussed. Peculiar bands in the NIR spectra due to overtones and combination bands have been identified. Moreover, by means of a commercial/industrial TOMRA sorting equipment (Tomra weblink), a suitable NIR dataset has been set up. The test demonstrated the possibility to identify these complex polymeric films and to locate the presence of PVDC layers. This opens new possibilities in the fluxes of waste separation with higher sensitivity and accuracy.

Keywords: Polyvinylidenechloride (PVDC), multilayer films, polymer sorting, vibrational spectroscopy.

Riferimenti:

<https://www.greyparrot.ai>

Šuštar, V., Kolar, J., Lusa, L., Learner, T., Schilling, M., Rivenc, R., Khanjian, H. and Koleša, D., 2014. Identification of historical polymers using Near-Infrared Spectroscopy. *Polymer degradation and stability*, 107, pp.341-347.

M. Gussoni, 1986, *Journal of Molecular Structure*, 1986, 141 pag.63-92

<https://www.tomra.com/en/waste-metal-recycling/applications/waste-recycling/plastics>

O9: Valutazione Preliminare dei Contaminanti nei Tessuti Post-consumo con Spettroscopia NIR accoppiata a Chemiometria

Chiara Cressoni¹, Giorgia Zanchin¹, Roberto Casalini², Andrea Fiorati², Claudio Brugnoni^{1*}, Luigi De Nardo²

¹ Centro Tessile Cotoniero e Abbigliamento S.p.A., Piazza S.Anna, 2, 21052 Busto Arsizio (VA)

claudio.brugnoni@centrocot.it

² Department of Chemistry, Materials, and Chemical Engineering “Giulio Natta”, Politecnico di Milano, Milan, Italy

L'obbligatorietà della raccolta differenziata della frazione tessile, che sarà in vigore in Europa dal 2025, pone una certa urgenza sullo sviluppo di un iter di raccolta, separazione e riciclo che sia efficace e sicuro. Risulta fondamentale in particolar modo lo sviluppo di una tecnica che permetta di valutare la sicurezza chimica dei capi tessili, ad oggi demandata ad analisi di laboratorio sofisticate e non eseguibili *in loco* (Undas et al., 2023). Lo studio di tecniche alternative è dunque di grande interesse; a questo scopo possono essere sfruttate tecnologie già applicate in altri ambiti, come ad esempio quello del *food* e del *pharma* (Igne et al., 2021).

Il presente contributo ha lo scopo di dimostrare sperimentalmente la possibilità di rilevare sostanze contaminanti presenti su materiali tessili mediante spettroscopia NIR. Sono stati selezionati contaminanti che siano rappresentativi per diverse tipologie di sostanze presenti sui tessuti (residui di fasi di lavorazione, contaminazioni dall'uso, trattamenti funzionali).

Tramite un'analisi statistica qualitativa delle componenti principali (PCA), è stato possibile discriminare in modo semplice, veloce e non distruttivo un tessuto contaminato da uno non contaminato. Per garantire una maggiore rappresentatività di fibre tessili, la metodologia è stata sviluppata su un tessuto in poliestere e successivamente estesa al cotone e al poliestere post-consumo. La tecnica NIR accoppiata a chemiometria offre dunque un'interessante prospettiva nell'ambito dello screening dei rifiuti tessili contaminati, al fine di ottenere materie prime seconde omogenee e sicure, riducendo tempi e costi dell'analisi, e permettendo un'analisi diretta del campione tessile nel punto di raccolta o smistamento.

Keywords: rifiuti tessili, rilevazione dei contaminanti, economia circolare, riciclo, sicurezza chimica

Ringraziamenti: Gli autori ringraziano per il finanziamento ricevuto dal Ministero dell'Ambiente e della Sicurezza Energetica (MATE.RIA_2022_D33B22000030004).

O9: Preliminary Assessment of Contaminants in Post-consumer Textiles with NIR Spectroscopy and Chemometrics

The mandatory separate collection of the textile fraction, which will be in force in Europe starting in 2025, places a certain urgency on developing a collection, separation, and recycling process that is effective and safe. In particular, the development of a technique that allows the assessment of the chemical safety of textile garments is particularly fundamental. Until now, this has been performed with sophisticated laboratory analyses that cannot be carried out on-site (Undas et al., 2023). Therefore, the study of alternative techniques is of great interest; for this purpose, technologies already applied in other fields, e.g. food and pharma, can be exploited (Igne et al., 2021). This contribution aims to experimentally demonstrate the possibility of detecting contaminating substances on textile materials using NIR spectroscopy. Representative contaminants for different substances on the fabrics (residues from processing phases, contamination from use, functional treatments) have been selected.

Through a qualitative statistical analysis of the principal components (PCA), it was possible to discriminate a contaminated tissue from a non-contaminated one simply, fast, and non-destructively. To ensure greater representativeness of textile fibres, the methodology was developed on a new polyester fabric and subsequently extended to cotton and post-consumer polyester. The NIR technique coupled with chemometrics offers an interesting perspective in screening contaminated textile waste to obtain homogeneous and safe secondary raw materials, reducing analysis times and costs, and allowing direct analysis of the textile sample at the collection or sorting point.

Keywords: textile waste, contaminants detection, circular economy, recycling, chemical safety

Acknowledgements: First Author gratefully acknowledges funding programme of Italian Ministry of Environment and Energy Security (MATE.RIA_2022_D33B22000030004).

Riferimenti:

- Undas, A.K., Groenen, M., Peters, R.J. and van Leeuwen, S.P., 2023. Safety of recycled plastics and textiles: Review on the detection, identification and safety assessment of contaminants. *Chemosphere*, 312, p.137175.
- Igne, B. and Ciurczak, E.W., 2021. Near-infrared spectroscopy in the pharmaceutical industry. *Near-Infrared Spectroscopy: Theory, Spectral Analysis, Instrumentation, and Applications*, pp.391-412.

O10: Spettroscopia NIR applicata nel campo degli Additivi Plastici (HALS) e dei Poliuretani

Emanuele Pizzano¹, Sonja Hardy², Monique Müller³, Daniele Moreschi⁴, Marcello Ricci⁴

¹ ALMA MATER STUDIORUM - Università di Bologna, Dipartimento di Chimica G. Ciamician, Via Francesco Selmi, 2, 40126 Bologna BO, Italia, emanuele.pizzano2@unibo.it

² BASF Personal Care and Nutrition GmbH, Henkelstraße 67, 40589 Düsseldorf, Germania

³ BASF Polyurethanes GmbH, Elastogranstraße 60, 49448 Lemförde, Germania

⁴ BASF Italia S.p.A., Via Pila 6/3, 40037 Pontecchio Marconi BO, Italia

La tecnica spettroscopica NIR è utilizzata in diversi settori industriali come quello alimentare (Grassi et al., 2018), farmaceutico (Jamrógiewicz, 2012). Nel nostro caso, abbiamo applicato la tecnica nel campo delle ammine stericamente ingombrate (HALS) utilizzando la regressione PLS per la quantificazione di analiti di interesse. Questo approccio ha portato a diversi benefici, tra i quali la riduzione dei tempi di analisi, riduzione di materiali analitici, solventi, e quantificazione di analiti non facilmente misurabili con le convenzionali tecniche cromatografiche o spettroscopiche. I modelli sono 11 e raggiungono elevati valori di R^2 , spesso superiori al 99,0 %. Abbiamo anche utilizzato l'indice RPD per monitorare la qualità dei modelli. In molti casi per ottenere performance analitiche sufficientemente elevate per le nostre esigenze, i valori di RPD devono essere oltre 10. Data l'elevata compatibilità della tecnica NIR per i processi online, abbiamo sviluppato anche dei modelli dedicati per l'applicazione nel campo dei Poliuretani (PU). Nello specifico, abbiamo sviluppato un modello che è capace di quantificare il contenuto di acqua in uno specifico componente di PU. Questa è stata una sfida impegnativa data l'elevata variabilità della matrice e l'elevata esattezza richiesta dal modello. Ne consegue utilizzo di una strategia di nesting di due diversi modelli NIR: uno generico con R^2 di 99,8 % ed RPD di 17,2, ed uno specifico per basse concentrazioni di acqua con R^2 di 99,7 % ed RPD di 18,5.

Parole chiave: HALS, poliuretani, monitoraggio di processo, metodi analitici, chemiometria

Ringraziamenti: Gli autori ringraziano la Prof.ssa Assimo Maris, la Dr.ssa Marzia Mazzacurati, l'Ing. Rene Wiegmann, per la supervisione dei progetti. Infine, l'autore corrispondente ringrazia BASF Italia S.p.A. per aver finanziato la borsa di dottorato in Chimica e ricerca nel campo della spettroscopia NIR.

O10: Near-infrared spectroscopy applied in the field of Plastic Additives (HALS) and Polyurethanes

NIR spectroscopic technique is widely used in various industrial sectors such as food (Silvia Grassi et al., 2018), pharmaceutical (Jamrógiewicz, 2012). In our case, we have applied the technique in the field of hindered amine light stabilizers (HALS) production, using PLS regression to quantify analytes of interest. This approach has led to several benefits, including reduced analysis time, and reduced materials, solvents, and quantification of analytes that are not easily quantifiable through chromatographic or most spectroscopic techniques. Currently we developed 11 models that achieve high R^2 values, often exceeding 99.0%. We have also used the RPD index to monitor the quality of the models. In many cases, to achieve sufficiently high analytical performance for our needs, RPD values must be above 10. Given the high compatibility of NIR technique for online processes, we have also developed dedicated models for application in the field of Polyurethanes (PU). Specifically, we have developed a model that can quantify water content in a specific PU component. This has been a challenging task given the high variability of the matrix and the high accuracy required by the model. As a result, a different strategy was applied, which involved nesting two different NIR models: one general model with an R^2 of 99.8% and RPD of 17.2, and one specific for low concentrations of water with an R^2 of 99.7% and RPD of 18.5.

Keywords: HALS, polyurethanes, process monitoring, analytical methods, chemometrics

Acknowledgements: The authors would like to thank Prof. Assimo Maris, Dr. Marzia Mazzacurati, Ing. Rene Wiegmann for project supervision. Finally, the corresponding author thanks are extended to BASF Italia S.p.A. for funding the doctoral scholarship in Chemistry and research in the field of NIR spectroscopy.

Riferimenti:

- Grassi, S. and Alamprese, C., 2018. Advances in NIR spectroscopy applied to process analytical technology in food industries. *Current Opinion in Food Science*, 22, pp.17-21.
- Jamrógiewicz, M., 2012. Application of the near-infrared spectroscopy in the pharmaceutical technology. *Journal of pharmaceutical and biomedical analysis*, 66, pp.1-10.

O11: Applicazione della spettroscopia NIR per l'autenticità di prodotti carnei da allevamento estensivo

Giacomo Squeo¹, Davide De Angelis¹, Michela P. Totaro¹, Florinda Artuso², Luca Fiorani², Antonia Lai², Michele Faccia¹, Francesco Caponio¹, Carmine Summo¹

¹ Università degli Studi di Bari Aldo Moro, Via Amendola 165/A, 70126 Bari, Italy, giacomo.squeo@uniba.it

² NUC-TECFIS-DIM, ENEA, Via Enrico Fermi 45, 00044 Frascati, Italy

L'autenticità dei prodotti carnei è solitamente di natura documentale e soggetta a possibili pratiche fraudolente. La spettroscopia NIR potrebbe rappresentare una soluzione analitica efficiente per assicurarne la genuinità. In questo studio, sono stati innanzitutto collezionati campioni di grasso di suini allevati estensivamente ed intensivamente, analizzati mediante spettroscopia NIR. Dopo esplorazione del dataset, è stato sviluppato e testato un modello di autenticità per la classe "estensivo" mediante DD-SIMCA (Zontov et al., 2017). I risultati hanno mostrato come un modello basato su 4 PC pretrattato mediante SNV permettesse di ottenere una perfetta sensibilità e specificità anche in validazione (Totaro et al., 2023). Successivamente, si è valutata l'applicabilità dell'imaging iperspettrale nel range NIR, per autenticare prodotti più complessi come i salumi fermentati. Campioni da allevamento estensivo ed intensivo sono stati collezionati e le immagini iperspettrali di fette dei campioni raccolte. Il K-means clustering è stato utilizzato per selezionare i pixels appartenenti alla frazione grassa quindi gli spettri per ciascun campione mediati ed infine i dati sono stati esplorati mediante PCA dopo idonei preprocessamenti. Risultati preliminari hanno mostrato una separazione dei campioni nello score plot in accordo con il sistema di allevamento mostrando come la tecnica sia estremamente promettente.

Parole chiave: qualità, autenticità, SIMCA, imaging

Ringraziamenti: Gli autori ringraziano per il finanziamento ricevuto dal Centro Nazionale Agritech, finanziato dall'Unione Europea - NextGenerationEU (Piano Nazionale di Ripresa e Resilienza (PNRR) - Missione 4 Componente 2, Investimento 1.4 - D.D. 1032 17/06/2022, CN00000022). I punti di vista e le opinioni espresse sono tuttavia solo quelli degli autori e non riflettono necessariamente quelli dell'Unione europea o della Commissione europea. Né l'Unione Europea né la Commissione Europea possono essere ritenute responsabili per essi.

O11: Application of NIR spectroscopy for the authenticity of meat products from extensive rearing

The authenticity of meat products is usually of a documentary nature and subject to possible fraudulent practices. NIR spectroscopy could represent an efficient analytical solution to evaluate the genuineness of these products. In this study, fat samples from extensively and intensively reared pigs were collected and analysed by NIR spectroscopy. After an exploration of the dataset, an authenticity model for the “extensive” class was developed and tested using DD-SIMCA (Zontov et al., 2017). The results showed that a model based on 4 PCs preprocessed using SNV allowed to reach perfect sensitivity and specificity, also in validation (Totaro et al., 2023). As a next step, the applicability of NIR hyperspectral imaging to authenticate more complex products such as fermented cured meats was evaluated. Samples from extensive and intensive farming were collected and hyperspectral images of samples slices collected. K-means clustering was used to select the pixels belonging to the fat portion, then the spectra for each sample were averaged and finally the data were explored by PCA after suitable preprocessing. Preliminary results showed a separation of the samples in the score plot in agreement with the rearing system, showing that the technique is extremely promising.

Keywords: quality, authenticity, SIMCA, imaging

Acknowledgements: the authors gratefully acknowledge receiving funding from Agritech National Research Center and received funding from the European Union Next - GenerationEU (Piano Nazionale di Ripresa e Resilienza (PNRR) - Missione 4 Componente 2, Investimento 1.4—D.D. 1032 17/06/2022, CN00000022). This manuscript reflects only the authors’ views and opinions, neither the European Union nor the European Commission can be considered responsible for them.

Riferimenti:

- Zontov, Y.V., Rodionova, O.Y., Kucheryavskiy, S.V. and Pomerantsev, A.L., 2017. DD-SIMCA-a MATLAB GUI tool for data driven SIMCA approach. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 167, pp.23-28.
- Totaro, M.P., Squeo, G., De Angelis, D., Pasqualone, A., Caponio, F. and Summo, C., 2023. Application of NIR spectroscopy coupled with DD-SIMCA class modelling for the authentication of pork meat. *Journal of Food Composition and Analysis*, 118, p.105211.

O12: Metodi non distruttivi per la predizione dei principali costituenti in frutti di pomodoro

Hassan Fazayeli, Danial Fatchurrahman, Maria Luisa Amodio, Giancarlo Colelli

Dipartimento di Scienze Agrarie, Alimenti, Risorse Naturali e Ingegneria (DAFNE), Università di Foggia, Via Napoli 25, 71122 Foggia, Italy, marialuisa.amodio@unifg.it

Scopo dello studio è stato quello di confrontare tecniche non distruttive quali la spettroscopia a trasformata di Fourier (FT-NIR) e l'imaging iperspettrale Vis-NIR e NIR per la predizione dei maggiori costituenti del pomodoro. Per ampliare il range di applicabilità dei modelli sono stati utilizzati pomodori di due cicli di produzione e due varietà ("Carminio" e "Mose"), coltivati con 3 regimi di coltivazione idroponica, che variavano nell'uso di acqua e fertilizzanti. Immagini iperspettrali (HSI) nella regione Vis-NIR (400-1000 nm) e NIR (900-1700 nm), insieme a spettri di riflettanza ottenuti mediante spettroscopia a trasformata di Fourier (FT)-NIR, sono state acquisite durante tutto il periodo di raccolta, su circa 250 pomodori a diversi stadi di maturazione. È stata valutata la composizione interna dei singoli frutti in termini di contenuto di solidi solubili totali (TSS), pH, acidità totale titolabile (TA), acido L-ascorbico (AA) e vitamina C (VC). I modelli predittivi per ciascun attributo di qualità sono stati sviluppati utilizzando l'analisi di regressione PLS applicata agli spettri HSI (Vis-NIR e NIR) e FT-NIR. I modelli costruiti su dati FT-NIR e selezione delle variabili hanno dimostrato una precisione e una robustezza superiori in predizione (R^2 di 0,96, 0,93, 0,89, 0,81, 0,83 per pH, TSS, TA, AA, VC, rispettivamente) rispetto al modello ottenuto utilizzando l'imaging iperspettrale. Lo studio evidenzia l'efficacia della spettroscopia FT-NIR nell'esame non distruttivo della qualità e della composizione dei pomodori. In particolare, i risultati per il contenuto di vitamina C sono più promettenti di quanto finora riportato in letteratura, mentre per gli altri componenti, come i TSS, si riportano performance simili o migliori, considerando le condizioni sperimentali e la variabilità analizzata. Queste tecnologie avanzate offrono potenziali vantaggi nei processi di valutazione e classificazione della qualità, portando a una migliore selezione dei prodotti e a una riduzione degli sprechi.

Keywords: FT-NIR, imaging iperspettrale, solidi solubili, Vitamina C, acidità

O12: Optical techniques for non-destructive Prediction of Internal Constituent of Tomatoes

This study aimed to assess the potential of non-destructive optical techniques including Hyperspectral images (HSI) and Fourier Transform (FT)-NIR spectroscopy in predicting internal quality constituents of tomatoes. To scale up the experiment, three distinct hydroponic growing techniques, varying in water and fertilizer use, were implemented across two cultivation cycles for two tomato varieties (cv 'Carminio' and cv 'Mose'). Hyperspectral images (HSI) in the Vis-NIR and NIR range, along with reflectance spectra obtained through Fourier Transform (FT)-NIR spectroscopy, were acquired throughout the harvesting period, on approximately 250 tomatoes at different maturity stages. Internal composition of individual fruit in term of total soluble solid content (TSS), pH, total titratable acidity (TA), L-ascorbic acid (AA), and vitamin C (VC) was assessed. Predictive models for each quality attribute were developed using Partial Least Squares Regression Analysis (PLSR) applied to HSI (Vis-NIR and NIR) and FT-NIR spectrometer spectra. Models constructed on FT-NIR data with selected ranges demonstrated superior accuracy and robustness in prediction (R^2 of 0.96, 0.93, 0.89, 0.81, 0.83 for pH, TSS, TA, AA, VC, respectively) compared to model obtained using hyperspectral imaging. These findings demonstrate the potential FT-NIR spectroscopy, in predicting chemical components in intact tomatoes. Notably, our results for Vitamin C content exceeded reported literature values, while other components, such as TSS, showed similar or better trends, considering experimental conditions and inherent variability. These advanced technologies offer potential benefits in quality assessment and grading processes, leading to enhanced product selection and reduced waste.

Keywords: FT-NIR, hyperspectral imaging, vitamin C, soluble solids, acidity.

O13: Trama e ordito delle immagini iperspettrali NIR: le sfide dei tessuti

Giulia Gorla¹, Frederik Nielsen², Patrick Bowen Montague², Nicole Kösegi³, José Manuel Amigo^{1,4}

¹ Department of Analytical Chemistry, Faculty of Science and Technology, University of the Basque Country UPV/EHU, Sarriena s/n, 48940 Leioa, Basque Country, Spain, giulia.gorla@ehu.eus

² NKT Photonics A/S, Blokken 84, 3460 Birkerød, Denmark

³ Boer Group Recycling Solutions B.V., Kilkade 23, 3316 BC Dordrecht, Netherlands

⁴ Ikerbasque, Basque Foundation for Sciences, María Díaz de Haro, 3, Bilbao, 48013, Spain

Il riconoscimento e la classificazione di materiali tessili sono estremamente importanti per il loro riutilizzo e riciclo (Cura et al., 2021). I campioni tessili rappresentano materiali complessi a causa della loro composizione chimica e delle caratteristiche fisiche (Peets et al., 2019).

In questo studio, sono stati analizzati campioni con diverse caratteristiche composizionali e proprietà di riflettanza utilizzando una camera iperspettrale SWIR Specim (Spectral Imaging Ltd., Oulu, Finlandia). Come fonti luminose sono state valutate lampade alogene e una sorgente laser supercontinua di NKT Photonics. Sono stati esaminati i problemi derivanti dalla natura della superficie dei campioni e dalla loro composizione. Sono state anche testate le potenzialità delle diverse fonti luminose e delle configurazioni di acquisizione. L'analisi multivariata ha permesso una comprensione più profonda delle problematiche legate all'identificazione dei materiali. Inizialmente, si è condotta analisi esplorativa dei dati attraverso analisi delle componenti principali (PCA) e tecniche di clustering e successivamente, è stata utilizzata la Multivariate Curve Resolution per separare i componenti spettrali dei tessuti.

Parole chiave: tessuti, problematiche di acquisizione, classificazione e identificazione, chemiometria, riciclo

Ringraziamenti: Gli autori ringraziano per il finanziamento ricevuto da Inno Fund Denmark (Hyper-spectral imaging for advanced textile sorting and food control. Grand Solutions application. 2023 HYPERSORT).

O13: The warp and weft of hyperspectral NIR images: textiles challenges

The accurate recognition and sorting of textile materials are extremely important for their reuse and recycling, as they can ensure the added value of the recycled materials (Cura et al., 2021). Textile samples represent highly complex materials due to their chemical composition and physical characteristics. The chemical information primarily pertains to the raw materials, dyes, and chemical treatments, while optical and physical characteristics may include thickness, surface texture, colour, and transparency (Peets et al., 2019).

In this study, samples of various textile compositions (e.g., cotton, polyester, elastane, linen) and reflectance properties were analyzed using a Specim SWIR camera (Specim, Spectral Imaging Ltd., Oulu, Finland). Halogen lamps and a NKT Photonics Supercontinuum light were evaluated as light sources. Challenges arising from the nature of the sample surfaces and the composition were investigated. The potentialities of the different light sources and acquisition configurations were tested. Spectra interpretation and multivariate analysis facilitated a deeper understanding of the issues related to material identification and suggested possible solutions for data acquisition. Firstly, data exploration involved Principal Component Analysis and clustering techniques was conducted. Subsequently, Multivariate Curve Resolution was employed to separate spectral components of the textiles.

Keywords: textiles, acquisition challenges, sorting and identification, chemometrics, recycling

Acknowledgements: the authors gratefully acknowledge receiving funding from Inno Fund Denmark (Hyper-spectral imaging for advanced textile sorting and food control. Grand Solutions application. 2023 HYPERSORT).

Riferimenti:

- Cura, K., Rintala, N., Kamppuri, T., Saarimäki, E. and Heikkilä, P., 2021. Textile recognition and sorting for recycling at an automated line using near infrared spectroscopy. *Recycling*, 6(1), p.11.
- Peets, P., Kaupmees, K., Vahur, S. and Leito, I., 2019. Reflectance FT-IR spectroscopy as a viable option for textile fiber identification. *Heritage Science*, 7(1), pp.1-10.

O14: Un sistema spettrale IoT per il monitoraggio della maturazione dell'uva: definizione di una strategia di rilevamento delle anomalie

Alessio Tugnolo¹, Francesco Villa², Hugo M. Oliveira³, Roberto Beghi¹, Riccardo Guidetti¹, Marco Gherardi^{2,*} e Valentina Giovenzana¹

¹ Dipartimento di Scienze Agrarie e Ambientali - Produzione, Territorio, Agroenergia (DiSAA). Università degli Studi di Milano, Via Celoria 2, 20133, Milano, Italia, alessio.tugnolo@unimi.it

² Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano, Via Celoria 16, 20133, Milano, Italia.

³ International Iberian Nanotechnology Laboratory, Av. Mestre José Veiga s/n, Braga, Portugal
[*marco.gherardi@unimi.it](mailto:marco.gherardi@unimi.it)

Il monitoraggio accurato della maturazione dell'uva da vino è un aspetto cruciale per gestire al meglio il vigneto e garantire le caratteristiche qualitative del prodotto finale. Questo dipende principalmente dalla qualità delle uve raccolte e conferite in cantina. In questo studio, viene presentato un nuovo sistema di monitoraggio ottico (in-situ) della maturazione dell'uva attraverso segnali a riflettanza diffusa, basato su un sistema autonomo IoT. Tale sistema è stato progettato, caratterizzato e testato sia in laboratorio che in campo e comprende, principalmente, un modulo ottico (lunghezze d'onda di emissione 530, 630, 690 e 730 nm) e un modulo di controllo (Oliveira et al., 2024).

I modelli predittivi per solidi solubili totali (TSS), alcol potenziale (PA), pH e acidità titolabile (TA) sono stati sviluppati in laboratorio e successivamente applicati ai sensori in campo per un monitoraggio continuo e autonomo della maturazione, eseguito ogni notte durante l'intera campagna sperimentale. Nonostante la buona efficacia dei modelli sviluppati (RPD = 2.76 and $R^2 = 0.86$ for TSS; RPD = 2.58 and $R^2 = 0.85$ for PA; RPD = 3.65 and $R^2 = 0.92$ for TA; RPD = 2.27 and $R^2 = 0.79$ for pH), le acquisizioni ottiche sono sensibili a vari fattori ambientali, esterni e a variazione del cammino ottico tra sensore e acino che causano anomalie nell'acquisizione del segnale. Per questo motivo, sono stati testati vari metodi analitici non supervisionati, tra cui PCA, SVM, k-means e tecniche di deep learning, per sviluppare modelli analitici capaci di rilevare la diversa natura dei dati anomali che potrebbero influenzare le previsioni. Di conseguenza, tale approccio sarà utilizzato per ottimizzare l'elaborazione del segnale ottico, impiegando uno o più metodi in combinazione, al fine di fornire, ai modelli predittivi di maturazione, dati ottici meno distorti e più ricchi di informazione chimica utile all'operatore per una gestione ottimizzata dell'impianto.

Parole chiave: agricoltura di precisione, monitoraggio della maturazione, rilevamento delle anomalie, rilevamento prossimale

O14: An autonomous IoT spectral sensing system for grape ripening monitoring: definition of an anomaly detection strategy

Accurate monitoring of grape ripening is crucial for vineyard management and ensuring the quality of the final wine product. This relies primarily on the quality of harvested and processed grapes. In this study, a novel in-situ optical monitoring system for grape ripening assessment based on diffuse reflectance signals, integrated into an autonomous IoT system has been proposed. The system has been designed, characterized, and tested both in laboratory and field conditions, consisting mainly of an optical module (wavelengths at 530, 630, 690, and 730 nm) and a control module (Oliveira et al., 2024).

Predictive models for total soluble solids (TSS), potential alcohol (PA), pH, and titratable acidity (TA) were developed in the laboratory and subsequently applied to field-deployed sensors for continuous and autonomous monitoring of grape maturity, performed nightly throughout the entire experimental campaign. Despite the good performance of the developed models (RPD = 2.76 and $R^2 = 0.86$ for TSS; RPD = 2.58 and $R^2 = 0.85$ for PA; RPD = 3.65 and $R^2 = 0.92$ for TA; RPD = 2.27 and $R^2 = 0.79$ for pH), optical measurements are sensitive to various environmental, positioning, and external factors, which may cause anomalies in signal acquisition. Various unsupervised analytical methods including PCA, SVM, k-means, and deep learning techniques were tested to develop analytical models capable of detecting the different origins of anomalous data that could affect predictions. Consequently, this approach will be used to optimize optical signal processing, employing one or more methods in combination, to provide grape ripening predictive models with optical data that are less distorted and richer in chemical information useful for the operator, enabling correct and optimized vineyard management.

Keywords: precision agriculture, maturation monitoring, anomaly detection, proximal sensing

Riferimenti:

Oliveira, H.M., Tugnolo, A., Fontes, N., Marques, C., Geraldes, Á., Jenne, S., Zappe, H., Graça, A., Giovenzana, V., Beghi, R. and Guidetti, R., 2024. An autonomous Internet of Things spectral sensing system for in-situ optical monitoring of grape ripening: design, characterization, and operation. *Computers and Electronics in Agriculture*, 217, p.108599.

O15: Spettroscopia FT-NIR e regressione PLS per monitorare il contenuto di etanolo e l'acidità totale durante la fermentazione del mosto di uve rosse: valutazione dell'efficacia di diversi intervalli spettrali

Camilla Menozzi¹, Giorgia Foca¹, Rosalba Calvini¹, Lisa Catellani², Andrea Bezecchi², Beatrice Guzzi³, Paolo Tucci³, Alessandro Ulrici¹

¹ Dipartimento di Scienze della Vita, Università di Modena e Reggio Emilia, Via Amendola 2, 42122 Reggio Emilia, Italia, camilla.menozzi@unimore.it

² Acetaia San Giacomo, Strada Pennella, 1, 42017 Novellara (RE), Italia

³ Acetyca Srl, Via Ramazzotti, 24, 21047 Saronno (VA), Italia

Per migliorare la qualità di prodotto e l'efficienza nel monitoraggio di processo, la produzione di aceto è sempre più focalizzata sullo sviluppo di metodi rapidi e sostenibili. L'aceto di vino è prodotto attraverso una duplice fermentazione del mosto d'uva: inizialmente i lieviti trasformano gli zuccheri dell'uva in etanolo, successivamente ossidato ad acido acetico ad opera dei batteri acetici. Il processo richiede diverse settimane e un controllo costante dei livelli di etanolo e acidità totale. La versatilità, non-invasività e rapidità della spettroscopia NIR la rendono una tecnica ideale per l'implementazione in linea nel controllo di processo (Cozzolino, 2016). In questo studio è stato analizzato l'intero corso della duplice fermentazione di mosto di uve rosse per un periodo esteso. Abbiamo monitorato la fermentazione simultanea di due diversi batch, per valutare la riproducibilità della cinetica di processo su mosti di diversi vitigni mantenuti nelle stesse condizioni ambientali. Il contenuto di etanolo e l'acidità totale dei mosti in fermentazione sono stati analizzati per quasi quattro mesi tramite analisi di laboratorio classiche e spettroscopia FT-NIR. Il dataset di spettri è stato inizialmente esplorato con Analisi delle Componenti Principali (PCA), quindi sono stati sviluppati modelli di calibrazione Partial Least Squares (PLS) per predire il contenuto di etanolo e l'acidità totale. I modelli sono stati calcolati sull'intero range spettrale (800-2500 nm) e su due regioni ristrette (950-1650 nm e 800-1070 nm), per le quali sono disponibili in commercio sensori più economici e facilmente miniaturizzabili. L'analisi FT-NIR si è dimostrata efficace per determinare il contenuto di etanolo e l'acidità totale ($R^2_{Pred} > 0.98$), sia sull'intero range spettrale che nella regione 950-1650 nm. Risultati meno soddisfacenti, ma comunque accettabili, sono stati ottenuti nella regione 800-1070 nm ($R^2_{Pred} > 0.81$), a conferma della possibilità di utilizzo di strumenti dal costo contenuto per un monitoraggio in tempo reale del processo fermentativo.

Parole chiave: Mosto di uve rosse, Fermentazione, Monitoraggio di processo, Calibrazione multivariata

O15: FT-NIR spectroscopy and PLS regression to monitor ethanol content and total acidity during red grape must fermentation: evaluation of the effectiveness of diverse spectral ranges

To enhance product quality and efficiency in process monitoring, vinegar production is focusing on the development of faster and environmentally sustainable methods. Grape vinegar production involves a dual stage fermentation process of grape must: firstly, yeast transforms grape sugars into ethanol, and then acetobacteria oxidize ethanol into acetic acid. As this process entails several weeks, constant monitoring of ethanol content and total acidity levels is required. To this aim, NIR spectroscopy stands out for its remarkable versatility, non-invasiveness and speed, being an ideal technique for online implementation in process control (Cozzolino, 2016). In this work the entire progression of the dual fermentation process of red grape must over an extended period was investigated. We monitored the course of simultaneous fermentation for two different batches of red grape must, to assess the reproducibility of the process kinetics when musts from different grape varieties are kept under the same environmental conditions. Fermenting musts were analyzed for both ethanol content and total acidity over almost four months and using both classical laboratory analyses and FT-NIR spectroscopy. The spectral dataset was initially explored by Principal Component Analysis (PCA), then Partial Least Squares (PLS) calibration models were developed to predict ethanol and acidity. The calibration models were calculated considering the entire spectral range (800-2500 nm) and two narrower zones (950-1650 nm and 800-1070 nm), for which more cost-effective and easily miniaturizable sensors are commercially available. FT-NIR analysis has proven to be effective in accurately determining the ethanol content and total acidity ($R^2_{\text{Pred}} > 0.98$), over the entire range and in the 950-1650 nm region. Less satisfactory but still acceptable results were obtained in the 800-1070 nm region ($R^2_{\text{Pred}} > 0.81$), confirming the potential use of cost-effective devices for real-time fermentation monitoring.

Keywords: Red grape must, Fermentation, Process monitoring, Multivariate calibration

Riferimenti:

Cozzolino, D., 2016. State-of-the-art advantages and drawbacks on the application of vibrational spectroscopy to monitor alcoholic fermentation (beer and wine). *Applied Spectroscopy Reviews*, 51(4), pp.302-317.

O16: Sviluppo di un metodo analitico basato su metodi spettroscopici non-distruttivi e chemiometria per la classificazione di mele di diversa origine

Lorenzo Strani, Riccardo Sberveglieri, Samuele Pellacani, Caterina Durante, Marina Cocchi

Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia, Via Campi 103, 41125 Modena, lostrani@unimore.it

Il presente lavoro si concentra sull'analisi di campioni di mele di due varietà e di due origini diverse, con l'obiettivo di sviluppare un metodo analitico per distinguere varietà e origine utilizzando tecniche strumentali non distruttive. I campioni sono stati analizzati utilizzando uno strumento da banco UV-Vis-NIR, uno spettrometro NIR portatile e un micro-Raman confocale. Inizialmente è stato trovato il pretrattamento spettrale ottimale per ciascuna tecnica, rimuovendo rumore strumentale, background di fluorescenza, scattering e deriva della linea di base. La PCA ha evidenziato differenze tra campioni di varietà e origini diverse dovute alla colorazione e ai livelli di conservazione dei campioni. ASCA (Smilde et al., 2005) è stato utilizzato per valutare la significatività di varietà e origine, confermandola per entrambi i fattori per le tecniche NIR e UV-Vis, mentre l'analisi Raman ha mostrato significatività solo per la varietà. Il metodo di classificazione PLS-DA è stato utilizzato per prevedere la varietà e l'origine dei campioni di mele, ottenendo risultati promettenti per la predizione della varietà (Raman) e buone performance per la predizione della varietà e dell'origine (NIR e UV-Vis). Le informazioni spettrali ottenute dalle diverse tecniche sono state valutate insieme attraverso un approccio di low-level data fusion. I modelli di classificazione ottenuti con questo dataset hanno ottenuto i migliori risultati in termini di corretta classificazione, raggiungendo una sensibilità e una specificità del 100% per varietà e origine. Le tecniche UV-Vis e NIR hanno mostrato risultati promettenti per la distinzione dei due fattori in esame, mentre l'efficacia del Raman è stata limitata, probabilmente a causa di una strumentazione non ottimale per questa specifica applicazione. L'uso di uno strumento portatile NIR mostra potenzialità per il monitoraggio della qualità e la garanzia di tracciabilità geografica. Inoltre, è stato dimostrato come un approccio di data fusion possa migliorare le prestazioni dei modelli di classificazione.

Parole chiave: mele, tracciabilità, strumenti portatili, data fusion

O16: Development of an Analytical Method Based on Non-destructive Spectroscopic Methods and Chemometrics for the Classification of Apples of Different Origins

This work focuses on the analysis of apple samples of two varieties and two different origins. The aim was to develop an analytical method to distinguish variety and origin using non-destructive instrumental techniques. Samples were analyzed using a UV-Vis-NIR benchtop instrument, a portable NIR spectrometer and a confocal micro-Raman. Firstly, the optimal spectral pretreatment was found for each technique in order to remove instrumental noise, fluorescence background, scattering, and baseline drift. Acquired spectra were used to build exploratory models using PCA and ASCA (Smilde et al., 2005) methods. PCA helped assess differences between samples of different varieties and origins, highlighting differences in sample coloration (due to sun exposure) and preservation levels. ASCA was used to assess the significance of variety and origin factors, confirming it for both factors for NIR and UV-Vis techniques, while Raman analysis showed variety significance only. Then, PLS-DA classification method was used to predict the variety and origin of apple samples, yielding promising results for Raman-based variety prediction and good performances for NIR- and UV-Vis-based variety and origin prediction. Spectral information obtained from different techniques was also evaluated together through a low-level data fusion approach, utilizing exploratory PCA and PLS-DA classification to assess variety and origin separation and classification. Fusion models achieved the best classification results, attaining 100% sensitivity and specificity for variety and origin classification. UV-Vis and NIR techniques showed promising results for variety and origin distinction, while Raman's efficacy was limited, potentially due to a suboptimal instrumentation for this kind of application. The use of a portable instrument for NIR analysis shows potential for monitoring quality and ensuring geographical traceability throughout the production process. Moreover, it has been demonstrated how a data fusion approach can enhance the performances of the classification models.

Keywords: apples, traceability, portable instruments, data fusion

Riferimenti:

Smilde, A.K., Jansen, J.J., Hoefsloot, H.C., Lamers, R.J.A., Van Der Greef, J. and Timmerman, M.E., 2005. ANOVA-simultaneous component analysis (ASCA): a new tool for analyzing designed metabolomics data. *Bioinformatics*, 21(13), pp.3043-3048.

017: Le potenzialità della spettroscopia NIR in chimica forense: la datazione delle macchie di sangue

Sara Gariglio^{1,2}, Cristina Malegori¹, Alicja Menzyk^{3,4}, Grzegorz Zadora^{3,4}, Marco Vincenti⁵, Monica Casale¹, Paolo Oliveri¹

¹ Department of Pharmacy (DIFAR), University of Genova, Viale Cembrano 4, Genova (Italy),
sara.gariglio@edu.unige.it

² Department of Chemistry and Industrial Chemistry (DCCI), University of Genova, Via Dodecaneso 31, Genova (Italy)

³ Institute of Chemistry, University of Silesia in Katowice, Szkolna 9, Katowice (Poland)

⁴ Institute of Forensic Research in Krakow, Westerplatte 9, Krakow (Poland)

⁵ Department of Chemistry, University of Turin, Via Pietro Giuria 7, Torino (Italy)

Il problema della datazione delle macchie di sangue è molto studiato in ambito forense, in quanto definire quando una traccia è stata depositata ha un ruolo fondamentale nello stabilirne la correlazione con un evento criminoso. Finora questo tema è stato investigato principalmente per mezzo della spettroscopia UV-visibile e Raman, mentre gli studi che fanno riferimento alla spettroscopia nel vicino infrarosso (NIRS) sono limitati (Zadora et al., 2018). Questo è inaspettato, se si pensa che l'invecchiamento delle macchie di sangue è soprattutto dovuto alla degradazione delle proteine, che presentano segnali caratteristici nella regione NIR. Lo scopo di questo lavoro è, pertanto, verificare l'affidabilità della spettroscopia NIR per la datazione del sangue in diverse condizioni ambientali.

Uno studio preliminare ha coinvolto cinque soggetti cui sono state prelevate aliquote da 20µl di sangue in quattro sessioni analitiche. I campioni sono stati analizzati per 16 giorni con uno spettrofotometro NIR da banco (BUCHI s.r.l, Flawil, Switzerland). Gli spettri ottenuti sono stati sottoposti ad analisi chemiometrica tramite analisi delle componenti principali (PCA) e regressione dei minimi quadrati parziali (PLS). I dati hanno mostrato che la spettroscopia NIR è in grado di datare i campioni di sangue con una precisione paragonabile a quella delle altre spettroscopie, oltre ad essere poco influenzata da donatore, sessione analitica e pre-processing spettrale applicato.

Successivamente, uno strumento NIR portatile (MicroNIR® - Viavi Solutions Inc., Santa Rosa, California, USA) è stato impiegato insieme a una camera climatica (KMF115 - BINDER GmbH, Tuttlingen, Germany) per valutare l'invecchiamento di gocce di sangue su diversi tipi di substrati di deposizione (cotone, tessuto polietilenico, vetro, metallo) in diverse condizioni di temperatura, illuminazione ed umidità. L'analisi multivariata degli spettri ha mostrato che il NIR ha buone potenzialità soprattutto su substrati assorbenti. L'impiego di ANOVA simultaneous component analysis (ASCA) ha permesso di osservare quali dei fattori abbiano maggiore impatto sull'invecchiamento delle macchie di sangue.

Parole chiave: Chemiometria, datazione di tracce di sangue, forense, condizioni ambientali, regressione dei minimi quadrati parziali, cinetica di invecchiamento

017: Exploring the capabilities of NIR spectroscopy in forensic chemistry: the case of bloodstains dating

The issue of bloodstain dating is well studied in the forensic field, since establishing the timing of a specimen formation may have a fundamental role in determining its correlation with a criminal event. Until now, this topic has been investigated mainly through ultraviolet-visible and Raman spectroscopies, while only few studies apply near infrared spectroscopy (NIRS) (Zadora et al., 2018). This is surprising, since blood ageing is mainly due to changes in proteins, which are known to be active in the NIR range. Consequently, this analytical technique might deserve increased attention in this field. In the present study, NIR spectroscopy was applied to understand its reliability for dating bloodstains in different environmental conditions.

First, a proof-of-concept study involved five donors from which 20 μ l aliquots of blood were taken during four analytical sessions. Samples were analysed for 16 days with a benchtop NIR spectrophotometers (BUCHI s.r.l, Switzerland). Obtained spectra then underwent chemometric analysis by means of principal component analysis (PCA) followed by partial least square (PLS) regression. Results showed that NIR is able to provide a dating with an error of about 50 hours, comparable with what obtained in literature with other spectroscopies. An interesting feature of the method is that NIR spectra appeared to be independent from blood donor, analytical session and signal pre-processing.

Then, a handheld NIR device (MicroNIR® - Viavi Solutions Inc., USA) was used together with a climatic chamber (KMF115 - BINDER GmbH, Germany) to evaluate bloodstains ageing on different deposition substrates (cotton, polyblend fabric, glass, metal) in different conditions of temperature, humidity and illumination. Multivariate analysis of spectra showed that NIR has good dating potential mainly with non-absorbing substrates. Then, the use of ANOVA simultaneous component analysis (ASCA) enabled the evaluation of the influence of each factor, allowing to identify the aspects with higher impact on the degradation speed of bloodstains.

Keywords: chemometrics, bloodstain dating, forensic, near infrared spectroscopy, environmental conditions, partial least squares regression, ageing kinetics

Riferimenti:

Zadora, G. and Menzyk, A., 2018. In the pursuit of the holy grail of forensic science-Spectroscopic studies on the estimation of time since deposition of bloodstains. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 105, pp.137-165.

O18: Selezione di variabile per la valutazione della qualità della fibra negli alimenti per bovini

**Lorenzo Serva¹, Giorgio Marchesini¹, Giovanni Chillemi², Daniele Pietrucci²,
Francesco Renzi^{2,3}, Riccardo Valentini^{2,3}, Paolo Berzaghi¹, Severino Segato¹, Marco
Milanesi²**

¹ Dipartimento di Medicina Animale, Produzione e Salute, Università di Padova, Viale dell'Università 16, 35030 Padua, Italia; lorenzo.serv@unipd.it

² Dipartimento per la Innovazione nei sistemi Biologici, Agroali-mentari e Forestali, Università della Tuscia, 01100 Viterbo, Italia

³ Nature4.0 SB SRL, Viterbo (VT), Italia

L'impegno di fibra di qualità previene l'insorgenza di malattie dismetaboliche delle bovine (Morgante et al., 2007). L'uso di strumenti NIR a basso costo applicati multipunto nella stalla permetterebbe la valutazione della qualità degli alimenti. Qui abbiamo valutato se un numero ridotto di lunghezze d'onda (WVs) garantisca un'accuratezza di analisi per lo screening degli alimenti zootecnici. Spettri (339) di unifeed per vacche (TMRc), per tori (TMRb), siloerbe (GS) e silomais (MS) sono stati acquisiti con uno spettrofotometro da banco e successivamente analizzati per il tenore di sostanza secca (DM), aNDF, ADF e lignina. Il dataset è stato diviso trainig (Tr, 80%) testing (Ts 20%) set (500 campionamenti casuali). Un algoritmo Boruta-Randm Forest (RF) applicato al Tr ha individuato le WVs più importanti per DM e per la fibra. Le WVs selezionate sono state validate applicandole a una PLS testata sul Ts. I valori di importanza, pesati per il numero di volte che la lunghezza d'onda è stata selezionata, sono stati sommati e ordinati in ordine decrescente, individuando le prime sette WVs più importanti. Le WVs selezionate sono state usate per calibrare (Tr, Ts, 500 campionamenti) un NIR portatile e uno da banco, considerando tutti gli alimenti assieme o per singolo alimento. Le WVs più importanti per DM sono state selezionate nel range 1100-1500 nm, mentre per le frazioni fibrose tra 2000-2500 nm. La validazione sullo strumento portatile ha mostrato $R^2 > 0.6$ per aNDF, ADF e DM (quest'ultimo solo TMRc e TMRb). La validazione sullo strumento da banco ha mostrato $R^2 > 0.90$ per DM e 0.65 per aNDF e ADF. L'impegno di WVs (meno di 7) sembra essere promettente per l'analisi della DM e delle frazioni fibrose ad eccezione della lignina, ma influenzato influenzati dallo strumento impiegato.

Parole chiave: fibre, foraggio, selezione di feature, salute animale, machine learning

Ringraziamenti: Gli autori ringraziamo la dott.ssa Elisabetta Garbin, il dott. Sandro Tenti e il dott. Massimo Mirisola, per il loro aiuto nella ricerca.

O18: Variable Selection for Fiber Quality Assessment in Bovine Feed

Feeding with high-quality fiber prevents metabolic diseases in cattle (Morgante et al., 2007). Implementing low-cost NIR instruments at multiple points within a barn enables feed quality evaluation. We evaluated whether a reduced number of wavelengths (WVs) ensures accuracy in the analysis of livestock feed screening. A total of 339 feeds, including total mixed ratio for cows (TMRc) and bulls (TMRb), grass (GS) and maize silages (MS), were scanned using a benchtop spectrophotometer and further analysed for the dry matter (DM) and fiber fractions (aNDF, ADF, lignin). The dataset was divided into training (Tr, 80%) and testing (Ts, 20%) sets using random sampling (500 repetitions). A Boruta-Random Forest (RF) algorithm applied to the Tr identified the most significant DM and fiber fractions wavelengths. The selected WVs were validated using a PLS model evaluated on the Ts. The importance values, weighted by the number of times each wavelength was selected, were summed and ranked in descending order to identify the top seven most important WVs. Using the Tr and Ts, the selected WVs were employed to calibrate both a portable and a benchtop NIR instrument. The calibration was performed considering all feed types together or for each feed type separately. The most important WVs for DM were found in the 1100-1500 nm range, while those for fiber fractions were selected in the 2000-2500 nm range. Validation on the portable instrument showed R^2 values greater than 0.6 for aNDF, ADF, and DM (the latter only for TMRc and TMRb). Validation on the benchtop instrument yielded R^2 values greater than 0.90 for DM and 0.65 for aNDF and ADF. Using fewer WVs (less than seven) appears promising for analysing DM and fiber fractions, excluding lignin. However, the calibration results seem to be influenced by the instrument quality on which the selected WVs are applied.

Keywords: fiber, feed, feature selection, animal health, machine learning

Acknowledgements: The authors thank the CNX laboratory of the Department of MAPS at the University of Padua, particularly Dr Elisabetta Garbin, Dr Sandro Tenti, and Dr Massimo Mirisola, for their valuable assistance in this research.

Riferimenti

Morgante, M., Stelletta, C., Berzaghi, P., Giancesella, M. and Andrighetto, I., 2007. Subacute rumen acidosis in lactating cows: an investigation in intensive Italian dairy herds. *Journal of Animal Physiology and Animal Nutrition*, 91(5-6), pp.226-234.

O19: SpectrApp: una dashboard open-source per l'analisi (chemiometrica) di dati spettroscopici

Eugenio Alladio^{1,2}, Lorenzo Castellino^{1,2}, Rosario Casamassima³, Nicola Cavallini^{2,4}, Marco Pazzi^{1,2}, Alberto Mazzoleni^{1,2}, Marco Vincenti¹

¹ Dipartimento di Chimica, Università di Torino, Via P. Giuria 7, 10125 Torino, Italia,
eugenio.alladio@unito.it

² DataBloom Srl, Via P. Giuria 5, 10125 Torino, Italia

³ Reparto Investigazioni Scientifiche dei Carabinieri, Viale di Tor di Quinto, 119, 00191 Roma, Italia

⁴ Dipartimento di Scienza Applicata e Tecnologia (DISAT), Politecnico di Torino, Corso Duca degli Abruzzi 24, 10129 Torino, Italia

Nel contesto della chimica analitica forense (ma non solo), dove la precisione e la coerenza dei risultati sono fondamentali per l'integrità delle indagini, l'accesso a strumenti software open-source e intuitivi è diventato indispensabile. Questi strumenti non solo migliorano la qualità delle analisi, ma anche favoriscono la collaborazione e lo scambio di conoscenze tra professionisti del settore.

SpectrApp, un'applicazione open-source sviluppata in ambiente R Shiny e accessibile tramite il sito <http://www.spectrapp.unito.it>, si distingue come una risorsa preziosa nell'ambito dell'analisi dati in chimica forense. La sua interfaccia intuitiva offre agli utenti la possibilità di esplorare e analizzare dati spettroscopici e di varia natura analitica in modo agevole e efficiente. Questo facilita non solo la comprensione dei dati, ma anche la creazione di modelli chemiometrici personalizzati, promuovendo nel contempo la collaborazione e lo scambio di idee tra gli addetti ai lavori. Una delle principali caratteristiche di SpectrApp è la sua capacità di preprocessare i dati raccolti mediante una vasta gamma di approcci, rendendo più agevole il processo di preparazione dei dati per l'analisi. Successivamente, l'applicazione consente di costruire e validare modelli chemiometrici per diverse tipologie di analisi, che vanno dall'esplorazione dei dati tramite PCA, cluster analysis, t-SNE e UMAP, al class-modelling con SIMCA, alla discriminazione con kNN, PLS-DA e SVM, fino alla regressione con PCR e PLS-R.

L'utilizzo di un'interfaccia user-friendly rappresenta anche un'opportunità per gli utenti meno esperti di programmazione di avvicinarsi all'analisi dei dati forensi. Ciò consente loro di concentrarsi maggiormente sull'interpretazione dei risultati e sull'applicazione pratica delle analisi nella risoluzione dei casi, contribuendo così alla trasparenza e all'affidabilità delle indagini. SpectrApp si pone quindi come un importante strumento nella cassetta degli attrezzi dei professionisti della chimica analitica forense, fornendo loro gli strumenti necessari per condurre indagini accurate e ben documentate.

Parole chiave: dashboard open-source, user-friendly, chimica forense, chemiometria

Ringraziamenti: Gli autori ringraziano per il supporto ricevuto dal programma MUR "Dipartimenti di Eccellenza 2023-2027" (CUP: D13C22003520001).

019: SpectrApp: an open-source dashboard to (chemometrically) analyze spectroscopic data

In the context of forensic analytical chemistry (but not limited to it), where precision and consistency of results are crucial for the integrity of investigations, access to open-source and intuitive software tools has become indispensable. These tools improve the quality of analyses and foster collaboration and knowledge exchange among industry professionals.

SpectrApp, an open-source application developed in the R Shiny environment and accessible via the website <http://www.spectrapp.unito.it>, stands out as a valuable resource in data analysis in forensic chemistry. Its intuitive interface allows users to explore and analyze spectroscopic data and various analytical data types in a straightforward and efficient manner. This not only facilitates data comprehension but also enables the creation of customized chemometric models, thereby promoting collaboration and idea exchange among practitioners. One of the main features of SpectrApp is its ability to preprocess collected data using a wide range of approaches, making the data preparation process for analysis more manageable. Subsequently, the application allows for the construction and validation of chemometric models for various types of analyses, ranging from data exploration through PCA, cluster analysis, t-SNE, and UMAP, to class-modelling with SIMCA, discrimination using kNN, PLS-DA, and SVM, and regression with PCR and PLS-R.

The use of a user-friendly interface also provides an opportunity for less experienced programming users to engage in forensic data analysis. This allows them to focus more on interpreting results and applying analyses practically in case resolution, thereby contributing to the transparency and reliability of investigations. SpectrApp thus emerges as an essential tool in the toolkit of forensic analytical chemistry professionals, providing them with the necessary instruments to conduct accurate and well-documented investigations.

Keywords: open-source dashboard, user-friendly, forensic chemistry, chemometrics

Acknowledgements: the authors gratefully acknowledge the support from MUR program "Dipartimenti di Eccellenza 2023-2027" (CUP: D13C22003520001).

O20: Confronto delle prestazioni di quattro spettrometri NIR portatili nell'analisi di foraggi

Claudia Gambale¹, Viviana Cavallaro², Anastasia Shchegolikhina¹, Stefania Barzaghi¹, Andrea Gasparini¹, Laura Marinoni², Simone Dante³, Paolo Berzaghi³, Giovanni Cabassi¹

¹ Consiglio per la ricerca in agricoltura e l'analisi dell'economia agraria, centro di ricerca zootecnia e acquacoltura (CREA-ZA), Lodi, claudia.gambale@crea.gov.it

² Consiglio per la ricerca in agricoltura e l'analisi dell'economia agraria, centro di ricerca ingegneria e trasformazioni agroalimentari (CREA-IT), Milano.

³ Dipartimento di medicina animale, produzioni e salute (MAPS), Università degli studi di Padova.

Nella prospettiva dell'allevamento di precisione, la caratterizzazione rapida dei foraggi sta diventando un requisito sempre più importante nelle aziende agricole zootecniche con l'obiettivo di migliorare la salute e il benessere animale, ma anche di aumentare l'efficienza economica aziendale. Proprio in tale contesto si inserisce l'utilizzo strumenti portatili che si avvalgono della spettroscopia del vicino infrarosso (NIR) (Beć et al., 2022). In questo studio, si è utilizzato uno strumento da banco, lo spettrometro NIRFlex N500 (Buchi), come confronto per la valutazione delle prestazioni di quattro strumenti NIR portatili, i quali differiscono per le loro caratteristiche tecniche: i) AuroraNIR (GraiNit) con monocromatore dispersivo olografico e detector diode-array; ii) Polispec (IT-photonics), anch'esso con detector diode-array; iii) MicroNIR (VIAVI) con monocromatore basato su filtro lineare variabile (LVF); iv) NeoSpectra-scanner (SI-WARE) che è basato sulla miniaturizzazione dell'interferometro di Michelson. Per tale confronto, sono stati collezionati 119 campioni di trinciati di frumento e 175 di trinciati di mais, successivamente essiccati e macinati. I set di calibrazione e validazione sono stati ottenuti tramite l'utilizzo dell'algoritmo di Kennard-Stone DUPLEX (Kennard & Stone, 1969; Snee, 1977). Il confronto si è basato sulla capacità di caratterizzazione dei campioni per il loro contenuto di proteine totali (CP), fibra acido detersa (ADF), fibra neutro detersa (NDF), amido, zuccheri solubili in acqua (WSC), acidi grassi totali (TFA) e ceneri (ASH). I modelli di calibrazione sono stati ottenuti sia tramite l'utilizzo di metodi di regressione lineare (PLS) sia con metodi di regressione non lineare. Gli strumenti hanno presentato performance differenti; ad esempio, le CP (%SS) nei trinciati macinati di frumento sono state predette dallo spettrometro N500 con RMSEP=0.36, $R^2=0.99$ e RPD=4.14, mentre dai portatili sono state predette con: i) RMSEP=0.62, $R^2=0.96$ e RPD=2.38; ii) RMSEP=0.72, $R^2=0.93$ e RPD=2.05; iii) RMSEP=0.54, $R^2=0.94$ e RPD=2.74; iv) RMSEP=0.56, $R^2=0.94$ e RPD=2.66. Pertanto, gli strumenti NIR portatili possono rappresentare una buona alternativa agli strumenti da banco per l'analisi rapida di foraggi.

Parole chiave: spettrometri NIR portatili, chemiometria, foraggi, allevamento di precisione

Ringraziamenti: Lo studio è stato condotto nell'ambito del progetto NIRVanA, cofinanziato dall'operazione 1.2.01 "Informazione e progetti dimostrativi" del Programma di Sviluppo Rurale 2014 - 2020 della Regione Lombardia.

O20: Comparison of four portable NIR spectrometers effectiveness in fodder analysis

In a precision livestock farming perspective, the rapid characterisation of fodder is becoming increasingly important. It should help to increase farm economic efficiency and to improve animal health and welfare. Therefore, in this context the use of near infrared spectroscopy (NIR) handheld devices is very demanding (Beć et al., 2022). In this study, the prediction of a benchtop instrument, the NIRFlex N500 spectrometer (Buchi), was used to evaluate the performance of four portable NIR devices with different technical characteristics: (i) AuroraNIR (GraiNit) with holographic dispersive monochromator and diode-array detector, (ii) Polisphec (IT-photonics) with diode-array detector, (iii) MicroNIR (VIAMI) with linear variable filter (LVF)-based monochromator, (iv) NeoSpectra-scanner (SI-WARE) based on the miniaturisation of the Michelson interferometer. For this comparison the following samples were studied: wheat and corn above ground biomass samples (119 and 175 respectively) were collected, chopped, then dried and ground. Calibration and validation sets were obtained by using the Kennard-Stone DUPLEX algorithm (Kennard & Stone, 1969; Snee, 1977). The comparison was based on the ability to characterise the samples for crude protein (CP), acid detergent fiber (ADF) and neutral detergent fiber (NDF), starch, water soluble sugars (WSC), total fatty acids (TFA) and ash (ASH) content. Calibration models were obtained using both linear regression methods (PLS) and nonlinear regression methods. The devices presented different performances; e.g., the CP (%DM) in ground wheat were predicted by the NIRFlex N500 spectrometer with RMSEP=0.36, $R^2=0.99$ e RPD=4.14, while the statistics for the portable NIR spectrometers were: i) RMSEP=0.62, $R^2=0.96$ and RPD=2.38; ii) RMSEP=0.72, $R^2=0.93$ and RPD=2.05; iii) RMSEP=0.54, $R^2=0.94$ and RPD=2.74; iv) RMSEP=0.56, $R^2=0.94$ and RPD=2.66. Therefore, portable NIR instruments could be a good alternative to benchtop instruments for the rapid analysis of fodder.

Keywords: portable NIR spectrometers, chemometrics, fodder, precision livestock farming.

Acknowledgements: The study was conducted within the NIRVanA project, co-financed by operation 1.2.01 'Information and demonstrative projects' of the Rural Development Program 2014-2020 of the Lombardy Region.

Riferimenti:

- Beć, K.B., Grabska, J. and Huck, C.W., 2022. Miniaturized NIR spectroscopy in food analysis and quality control: Promises, challenges, and perspectives. *Foods*, 11(10), p.1465.
- Kennard, R.W. and Stone, L.A., 1969. Computer aided design of experiments. *Technometrics*, 11(1), pp.137-148.
- Snee, R.D., 1977. Validation of regression models: methods and examples. *Technometrics*, 19(4), pp.415-428.

O21: Analisi dei macronutrienti del latte utilizzando diversi NIR portatili

Viviana Cavallaro¹, Claudia Gambale², Anastasia Shchegolikhina², Andrea Gasparini², Stefania Barzagli², Laura Marinoni¹, Paolo Berzagli³, Giovanni Cabassi²

¹ Consiglio per la ricerca in agricoltura e l'analisi dell'economia agraria, centro di ricerca ingegneria e trasformazioni agroalimentari (CREA-IT), Milano, viviana.cavallaro@crea.gov.it

² Consiglio per la ricerca in agricoltura e l'analisi dell'economia agraria, centro di ricerca zootecnia e acquacoltura (CREA-ZA), Lodi

³ Dipartimento di medicina animale, produzioni e salute (MAPS), Università degli studi di Padova, Padova

La valutazione rapida e affidabile dei macronutrienti del latte è cruciale per il pagamento a qualità del latte, per ottimizzare la dieta e monitorare lo stato di salute delle bovine. I dispositivi di spettroscopia nel vicino-infrarosso (NIR) portatili hanno suscitato un crescente interesse in questo campo (Yakubu et al., 2022). In questo lavoro è stata valutata la capacità di quattro diversi NIR portatili nel predire la concentrazione dei macronutrienti (grasso e proteine) di 127 campioni di latte crudo individuale e latte di caldaia destinato a Grana Padano: i) Alba NIR (GrainIT), strumento basato su un dispositivo di selezione delle bande a microspecchi (SLM); ii) Neospectra (SI-Ware), strumento, basato sulla miniaturizzazione dell'interferometro di Michelson; iii) Polisphec (ITphotonics) e iv) MicroNIR (VIAMI), entrambi basati su diode array. Le letture sono state effettuate in trasmittanza con Alba NIR (cammino ottico 1 mm) e in transflettanza con Neospectra (cammino ottico 0.25 mm), Polisphec (cammino ottico 1 mm) e Micro NIR (cammino ottico 2 mm). Il dataset è stato suddiviso in set di calibrazione e validazione utilizzando il metodo Kennard-Stone duplex: 84 campioni sono stati utilizzati per la calibrazione, 43 per la validazione. Per la predizione del contenuto in grasso (g/100g) sono stati ottenuti i seguenti risultati: i), $R^2=0.988$, RMSEP= 0.235; ii), $R^2=0.801$, RMSEP= 0.515; iii) $R^2=0.960$, RMSEP= 0.379; iv), $R^2=0.931$, RMSEP= 0.196. Nel caso delle proteine (g/100g), sono stati ottenuti i seguenti risultati: i), $R^2=0.957$, RMSEP= 0.378; ii), $R^2=0.941$, RMSEP= 0.137; iii) $R^2=0.965$, RMSEP= 0.221; iv), $R^2=0.957$, RMSEP= 0.136. L'utilizzo di latte crudo senza omogeneizzazione del grasso ha richiesto di impiegare i filtri multivariati dei dati per ottimizzare i modelli relativi alle proteine. Sono state altresì effettuate prove di riproducibilità e ripetibilità per ogni strumento utilizzato.

Parole chiave: Strumentazione NIR portatile, latte crudo, grasso, proteine

Ringraziamenti: Il lavoro è stato sviluppato nell'ambito del progetto NIRVanA (Spettroscopia NIR a Vantaggio degli Allevamenti) cofinanziato dall'operazione 1.2.01 "Informazione e progetti dimostrativi" del Programma di Sviluppo Rurale 2014 - 2020 della Regione Lombardia.

O21: Analysis of milk macronutrients using different portable NIR devices

The swift and reliable evaluation of milk macronutrients is pivotal for quality-based milk payment, optimizing diet, and monitoring the health status of dairy cows. Portable Near-Infrared (NIR) spectroscopy devices have garnered increasing interest in this domain (Yakubu et al., 2022). This study assessed the capability of four distinct portable NIR devices in predicting the macronutrient (fat and protein) concentration of 127 individual raw milk and bulk tank milk samples intended for Grana Padano cheese: i) Alba NIR (GrainIT), an instrument based on a micro-mirror array (SLM) band selection device; ii) Neospectra (SI-Ware), an instrument utilizing Michelson interferometer miniaturization; iii) Polisphec (ITphotonics), and iv) MicroNIR (VIAMI) both based on diode array detectors. Measurements were conducted in transmittance mode with Alba NIR (optical path 1 mm) and in reflectance with Neospectra (optical path 0.25 mm), Polisphec (optical path 1 mm), and Micro NIR (optical path 2 mm). The dataset was divided into calibration and validation sets using the Kennard-Stone duplex method: 84 samples were used for calibration, 43 for validation. For fat content prediction (g/100g), the following results were obtained: i) $R^2 = 0.988$, RMSEP = 0.235; ii) $R^2 = 0.801$, RMSEP = 0.515; iii) $R^2 = 0.960$, RMSEP = 0.379; iv) $R^2 = 0.931$, RMSEP = 0.196. In the case of proteins (g/100g), the following results were achieved: i) $R^2 = 0.957$, RMSEP = 0.378; ii) $R^2 = 0.941$, RMSEP = 0.137; iii) $R^2 = 0.965$, RMSEP = 0.221; iv) $R^2 = 0.957$, RMSEP = 0.136. The use of raw milk without fat homogenization required the application of multivariate data filters to optimize protein-related models. Reproducibility and repeatability tests were also carried out for each portable instrument.

Keywords: Portable NIR instrumentation, raw milk, fat, protein

Acknowledgements: The authors acknowledge the funding received from the NIRVanA project (Spettroscopia NIR a Vantaggio degli Allevamenti), co-financed by operation 1.2.01 "Information and Demonstrative Projects" of the Rural Development Program 2014 - 2020 of the Lombardy Region.

Riferimenti:

Yakubu, H.G., Kovacs, Z., Toth, T. and Bazar, G., 2022. The recent advances of near-infrared spectroscopy in dairy production—A review. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, 62(3), pp.810-831.

O22: Sviluppo di un sistema micro-NIRS-app-cloud per la determinazione in loco della composizione nutrizionale dei mangimi avicoli e dei suoi vari ingredienti

Rossella Abbate^{1,5,*}, Agata Ishizaki-Sroka³, Michael Simmler², Kotaro Ishizaki³, Alessandro Mulloni⁴, Alexander Juste¹, Silvia Ampuero Kragten^{1*}

¹ Agroscope, Method Development and Analytics, 1725 Posieux, Switzerland

² Agroscope, Digital Production, 8356 Ettenhausen, Switzerland

³ aikemy GmbH, 8052 Zurich, Switzerland

⁴ Like Magic, Abt-Karl-Gasse 18 1180 Vienna, Austria

⁵ Department of Veterinary Medicine and Animal Sciences, University of Milan, Lodi, Italy,
rossella.abbate@unimi.it

Normalmente, i nutrizionisti, formulano le diete animali basandosi sui valori delle tabelle nutrizionali che sono variabili e approssimativi, questo può portare a una sotto o sovra-formulazione e quindi a inefficienza economica. Utilizzare una tecnologia come la spettroscopia del vicino infrarosso (NIRS) potrebbe essere una soluzione per evitare questo problema. Il progetto Pocket Feed Lab mira a sviluppare un micro-NIRS portatile utile per l'analisi di mangimi per pollame e suoi vari ingredienti. Il dispositivo, sviluppato da aikemy GmbH si basa sulla tecnologia MEMS (sistema micro-elettromeccanico), si connette con un'app mobile tramite Bluetooth e infine ai servizi cloud per l'analisi e l'archiviazione dei dati. I risultati vengono visualizzati in tempo reale come valori percentuali nell'app, con un punteggio passato/ fallito immediato per ogni nutriente. Tre diversi MEMS, che coprono diverse lunghezze d'onda del NIR, sono stati valutati per sviluppare il dual-MEMS finale. Le calibrazioni sono state fatte per prevedere proteine, fibre, grassi, carboidrati solubili in acqua, ceneri e umidità. Più di 1000 campioni (mangimi per pollame e i suoi vari ingredienti: mais, frumento, farina/panello di soia e distillers' grain) sono stati raccolti in Svizzera, in diversi paesi europei, negli Stati Uniti, e analizzati secondo metodi ufficiali presso il laboratorio di analisi accreditato Agroscope. Il training set di campioni copre le raccomandazioni sul contenuto proteico suggerite da diversi centri di ricerca ed è in linea con la composizione nutrizionale dei prodotti commerciali disponibili nel settore avicolo svizzero. Le statistiche dei modelli predittivi preliminari mostrano un buon potenziale del micro-NIRS in termini di coefficiente di determinazione (R^2), errore quadratico medio di previsione (RMSEP) e rapporto tra la deviazione standard del set di calibrazione e l'errore standard di previsione (RPD). Sulla base delle conoscenze attuali, questo dispositivo può essere uno strumento utile per l'alimentazione di precisione nel settore avicolo.

Keywords: Micro-NIRS, alimentazione di precisione, nutrizione animale, settore avicolo

Ringraziamenti: Gli autori ringraziano per il finanziamento ricevuto da Innosuisse - Swiss Innovation Agency (57417.1 IP-LSX).

O22: Development of a micro-NIRS with app and cloud to evaluate the nutritional composition of poultry feed and its various ingredients in situ

Usually, animal nutritionists formulate the animal's diets using the values of nutritional tables, which are variables and approximative, this can lead to, an under or over-formulation and consequently to economic inefficiency. Therefore, using technology like near-infrared spectroscopy (NIRS) could be a valid solution to avoid this issue. The Pocket Feed Lab project aims to develop a portable micro-NIRS useful for the analysis of poultry feed and poultry feed ingredients on site. The micro-NIRS sensor developed by aikemy GmbH is based on MEMS (micro electromechanical system) technology. It connects with a mobile app via Bluetooth and finally to cloud services for data analysis and storage. Results are displayed in near-real time as percentage values in the app, with an immediate pass/fail score for each nutrient. Three different MEMS, covering different regions of the NIR wavelength range, were explored for use in the final dual-MEMS design. The calibrations were done to predict crude protein, crude fiber, crude fat, water-soluble carbohydrates, crude ash, and moisture. More than 1000 samples (poultry feed and its various ingredients: corn, wheat, soybean meal/press cake, distillers' grain) were collected in Switzerland, different European countries, the USA, and analyzed according to official methods at the accredited analytical laboratory Agroscope. The training sample set covered the protein content recommendations suggested by different research centers and was in line with the nutrient composition of available commercial products reported by the Swiss poultry sector. The statistics of the preliminary prediction models showed a good potential of the micro-NIRS system in terms of coefficient of determination (R^2), root mean square error of prediction (RMSEP), and ratio of the standard deviation of the reference values of the validation set to the standard error of prediction (RPD). Based on current knowledge, this device may be a useful tool for precision feeding in poultry production.

Keywords: Micro-NIRS, precision feeding, animal nutrition, poultry sector

Acknowledgements: The authors gratefully acknowledge receiving funding from Innosuisse - Swiss Innovation Agency (57417.1 IP-LSX).

Riferimenti:

- Moss, A.F., Chrystal, P.V., Cadogan, D.J., Wilkinson, S.J., Crowley, T.M. and Choct, M., 2021. Precision feeding and precision nutrition: a paradigm shift in broiler feed formulation?. *Animal Bioscience*, 34(3), p.354.
- Steed, J.R., Romero-Sanchez, H., Han, Y., Page, G.I. and Davis, A.J., 2020. Validation of NutriOpt dietary formulation strategies on broiler growth and economic performance. *Journal of Applied Poultry Research*, 29(2), pp.314-327.

Elenco poster

- P1 - José María González-Sáiz
- P2 - Lucia Russo
- P3 - Giovanna Esposito
- P4 - Marina Buccheri
- P5 - Alessio Tugnolo
- P6 - Consuelo Giustizieri
- P7 - Stefano Pigaiani
- P8 - Federica De Agostini
- P9 - Caterina Durante
- P10 - Arnaud Molle
- P11 - Alberto Mazzoleni
- P12 - Roberto Beghi
- P13 - Cristina Malegori
- P14 - Tiziana M. P. Cattaneo
- P15 - Lucrezia Gatti
- P16 - Rosalba Calvini
- P17 - Veronica Ferrari
- P18 - Marina Cocchi
- P19 - Elena Cazzaniga
- P20 - Consuelo Pizarro
- P21 - Alessio Tugnolo
- P22 - Francesca Stella
- P23 - Danial Fatchurrahman
- P24 - Nicola Cavallini
- P25 - Emanuele Pizzano
- P26 - Federico Marini

P1: Sviluppo di un metodo per la rilevazione di biofenoli naturali ed esogeni nell'olio d'oliva extra vergine

José María González-Sáiz, Consuelo Pizarro, Isabel Esteban, Taha Mehani

Universidad de La Rioja (Spagna), josemaria.gonzalez@unirioja.es

La determinazione del contenuto di polifenoli nell'olio d'oliva, secondo il metodo ufficiale del Consiglio Oleicolo Internazionale (COI) per adempiere al Regolamento (UE) N°432/2012, implica l'estrazione di componenti polari biofenolici dall'olio usando una soluzione metanolica. Successivamente, vengono quantificati tramite HPLC e rilevamento UV a 280 nm, usando acido siringle come standard interno. Anche se è un metodo ufficiale del COI, è complesso e richiede un laboratorio specializzato, non misura con precisione biofenoli come idrossitirosolo e tirosolo nella loro forma coniugata e non distingue tra biofenoli naturali ed esogeni (Mora-Ruiz et al., 2016; Inarejos-García et al., 2013).

Questo lavoro propone un nuovo metodo per misurare i biofenoli negli oli d'oliva, utile per le dichiarazioni nutrizionali, che consente di controllare idrossitirosolo e i suoi derivati in modo semplice, affidabile ed economico. Questa tecnica differenzia l'olio d'oliva vergine extra (AOVE) di qualità, evidenziando il suo contenuto di polifenoli e verificando che l'idrossitirosolo non sia stato aggiunto in modo esogeno, ma sia stato ottenuto attraverso pratiche sul campo e di lavorazione. Sono stati registrati 399 spettri delle 133 campioni analizzati tramite spettroscopia nell'infrarosso vicino (NIR). Prima di prendere gli spettri, i campioni sono stati centrifugati a 20.000 r.p.m. per 30 minuti per eliminare impurità ed evitare problemi di dispersione della luce. È stato utilizzato un'analisi multivariata per rilevare i biofenoli aggiunti esogenamente. I dati NIR sono stati elaborati con il software chemiometrico Parvus e Unscrambler 11 (versione 11.0, Camo Software, Oslo, Norvegia). I livelli di fortificazione utilizzati: 0%, 5%, 10%, 25%, 50%, 75% e 100% corrispondono a sette livelli di fortificazione (da 1 a 7) che sono le categorie studiate quantitativamente.

Parole chiave: NIR, Polifenoli, Idrossitirosolo, Etichettatura nutrizionale, Biofenoli, Controllo di qualità, Fortificazione

Ringraziamenti: Gli autori ringraziano per il finanziamento ricevuto dal Marie Skłodowska-Curie COFUND dell'Unione Europea. (Grant agreement 801586)

P1: Development of a method for the detection of natural and exogenous bio-phenols in extra virgin olive oil

The determination of polyphenol content in olive oil, according to the official method of the International Olive Council (IOC) to comply with Regulation (EU) No 432/2012, involves extracting bio-phenolic polar components from the oil using a methanolic solution. Subsequently, they are quantified through HPLC and UV detection at 280 nm, using syringic acid as an internal standard. Although it's an IOC official method, it's complex and requires a specialized laboratory, it doesn't accurately measure certain bio-phenols like hydroxytyrosol and tyrosol in their conjugated form, and it doesn't distinguish between natural and exogenous bio-phenols (Mora-Ruiz et al., 2016; Inarejos-García et al., 2013).

This work proposes a new method to measure bio-phenols in olive oils, useful for nutritional declarations, which allows for simple, reliable, and cost-effective control of hydroxytyrosol and its derivatives. This technique differentiates high-quality Extra Virgin Olive Oil (EVOO), highlighting its polyphenol content and verifying that hydroxytyrosol wasn't added exogenously but obtained through field practices and processing.

A total of 399 spectra were recorded from the 133 samples analyzed using Near Infrared Spectroscopy (NIR). Before taking the spectra, samples were centrifuged at 20,000 rpm for 30 minutes to remove impurities and avoid light scattering issues. Multivariate analysis was used to detect exogenously added bio-phenols. NIR data were processed using the chemometric software Parvus and Unscrambler 11 (version 11.0, Camo Software, Oslo, Norway). The fortified levels used: 0%, 5%, 10%, 25%, 50%, 75%, and 100% correspond to seven fortification levels (from 1 to 7) constituting the categories studied quantitatively.

Keywords: NIR, Polyphenols, Hydroxytyrosol, Nutritional labeling, Bio-phenols, Quality control, Fortification

Acknowledgements: the authors gratefully acknowledge receiving funding from Marie Skłodowska-Curie COFUND of the European Union. (Grant agreement 801586).

Riferimenti:

- Mora-Ruiz, M.E., Reboledo-Rodríguez, P., Salvador, M.D., González-Barreiro, C., Cancho-Grande, B., Simal-Gándara, J. and Fregapane, G., 2017. Assessment of polar phenolic compounds of virgin olive oil by NIR and mid-IR spectroscopy and their impact on quality. *European Journal of Lipid Science and Technology*, 119(1), p.1600099.
- Inarejos-García, A.M., Gómez-Alonso, S., Fregapane, G. and Salvador, M.D., 2013. Evaluation of minor components, sensory characteristics and quality of virgin olive oil by near infrared (NIR) spectroscopy. *Food Research International*, 50(1), pp.250-258.

P2: Uso potenziale dell'immagine iperspettrale Vis-NIR e NIR come metodo non distruttivo per il rilevamento precoce del danno da freddo nelle zucchine

Lucia Russo, Danial Fatchurraman, Maria Luisa Amodio*, Giancarlo Colelli

Dipartimento di Scienze Agrarie, Alimenti, Risorse Naturali e Ingegneria (DAFNE)
Università di Foggia, Via Napoli 25, 71122 Foggia, Italy, *marialuisa.amodio@unifg.it

Le zucchine sono un prodotto sensibile al freddo, sebbene siano spesso conservate a temperature inferiori a 5 °C durante la catena di distribuzione. Per questo motivo, un rilevamento rapido e precoce delle zucchine precedentemente conservate a temperature di refrigerazione consentirebbe la corretta riassegnazione di questi frutti alle temperature corrette o, nel peggiore dei casi, il ritiro precoce dei frutti refrigerati dal mercato. Questa ricerca si proponeva di esplorare le potenzialità dell'imaging iperspettrale per il rilevamento precoce della frutta refrigerata. A tale scopo, i frutti di zucchine (cv. Asso) sono stati conservati a 2 °C e a 12 °C per 9 giorni, subito dopo la raccolta. Le immagini iperspettrali sono state scattate a 2, 6 e 9 giorni di conservazione. Lo scanner spettrale (versione 1.4, DV srl, Padova, Italia) aveva una risoluzione spaziale di 1000 × 2000 pixel (Vis-NIR) e 600 × 320 pixel (NIR), entrambi con una risoluzione spettrale di 5 nm. Inoltre, il danno da raffreddamento (CI) è stato valutato in base alla presenza di decolorazione gialla dell'area della polpa e di vaiolatura superficiale, valutata dopo un ulteriore giorno a temperatura ambiente per consentire lo sviluppo dei sintomi. Sono stati sviluppati modelli di classificazione supervisionati utilizzando l'analisi discriminante ai minimi quadrati (Partial Least Square Discriminant Analysis, PLS-DA) sui dati iperspettrali per classificare le zucchine in base alla temperatura di conservazione. Gli spettri grezzi sono stati pre-elaborati con diverse combinazioni di tecniche di pre-elaborazione spettrale e il set di dati è stato diviso in due gruppi (70% per la calibrazione e 30% per la validazione). I risultati mostrano che con gli spettri Vis-NIR è stato possibile discriminare i frutti refrigerati con un'accuratezza del 90 e 92% nella calibrazione e nella previsione, rispettivamente, già dopo 2 giorni di temperatura di refrigerazione. L'accuratezza è aumentata fino a valori superiori al 98% con l'aumentare della durata della conservazione. Il modello ottenuto con gli spettri NIR ha consentito un'accuratezza del 100% nella previsione, per frutti conservati per 9 giorni, ma prestazioni inferiori con frutti conservati per periodi più brevi, se confrontato con Vis-NIR. Questi risultati dimostrano il potenziale uso delle tecniche di imaging iperspettrale per individuare precocemente i danni da freddo nei frutti di zucca.

Keywords : immagini iperspettrali, zucchine, Vis-NIR, NIR, PLS-DA.

P2: The Potential Use of the Vis-NIR and NIR Hyperspectral Image as A Non-Destructive Method for Early Detection of Chilling Injury in Zucchini

Zucchini is a chilling sensitive product although it is often held at temperatures below 5 °C during the distribution chain. For this reason, rapid and early detection of zucchini previously stored at chilling temperatures would allow the correct reallocation of this fruit to the correct temperatures or the early withdrawal of chilled fruit from the market in the worst case. This research aimed to explore the potentiality of hyperspectral imaging for the early detection of chilled fruit. To this scope zucchini fruit (cv. Asso) were stored at 2 °C, and 12 °C for 9 days, soon after harvest. Hyperspectral images were taken at 2, 6, and 9 days of storage. The spectral scanner (version 1.4, DV srl, Padova, Italy) had a spatial resolution of 1000 × 2000 pixels (Vis-NIR) and 600 × 320 pixels (NIR), both with a 5 nm spectral resolution. In addition, chilling injury (CI) was assessed according to the presence of yellow discoloration of the flesh area and surface pitting, evaluated after one additional day at room temperature to allow symptoms to develop. Supervised classification models were developed using Partial Least Square Discriminant Analysis (PLS-DA) on hyperspectral data to classify zucchini fruit based on storage temperature. Raw spectra were pre-processed with different combinations of spectral preprocessing techniques, and the dataset was divided into two groups (70% for calibration, and 30% for validation). The result shows that with Vis-NIR spectra was possible to discriminate chilled fruit with accuracy of 90, and 92% in calibration and prediction, respectively, already after 2 days of chilling temperature. Accuracy increased to values higher than 98 % with an increase in the length of storage. The model obtained with NIR spectra allowed 100% accuracy in prediction, for fruit stored for 9 days but lower performance with fruit stored for shorter periods, if compared to Vis-NIR. These results demonstrate the potential use of hyperspectral imaging techniques to early detect chilling injury in zucchini fruit.

Keywords: Hyperspectral images, Zucchini, Vis-NIR, NIR, PLS-DA.

P3: Sviluppo di un facile e veloce metodo per discriminare rapidamente branzini selvaggi da quelli allevati con la spettroscopia NIR

Giovanna Esposito, Francesco Pennisi, Marzia Pezzolato, Elena Maria Bozzetta

Istituto Zooprofilattico Sperimentale del Piemonte, Liguria e Valle d'Aosta, via Bologna 148 - 10154, Torino, Italy, giovanna.esposito@izsto.it

Le caratteristiche nutrizionali e qualitative del pesce lo rendono un ottimo prodotto consigliato per la salute umana. Tuttavia, poiché gli stock ittici selvatici mondiali sono limitati e la domanda del mercato è aumentata negli ultimi dieci anni, l'acquacoltura si è sviluppata per offrire un'alternativa e ridurre i costi per i consumatori. La vendita di pesce allevato come selvaggio è una pratica fraudolenta, che richiede quindi lo sviluppo di metodi basati su tecniche sensibili, rapide e a basso costo, al fine di proteggere i consumatori dalle frodi commerciali e garantire la tracciabilità degli alimenti. I consumatori spesso non hanno strumenti o competenze per discriminare visivamente se un prodotto corrisponde a quanto indicato in etichetta; pertanto, è auspicabile un controllo specifico che li tuteli dalle frodi commerciali. La spigola (*Dicentrarchus labrax* L.) è una delle specie ittiche più importanti dal punto di vista economico nell'area del Mar Mediterraneo. Nonostante i severi requisiti relativi all'indicazione del metodo di produzione (selvaggio/allevato), l'etichettatura errata della spigola è una pratica ancora frequentemente rilevata. Lo scopo di questo studio è quello di valutare le capacità della spettroscopia del vicino infrarosso (NIR) di discriminare la spigola in base al metodo di produzione. Sono stati acquistati e immediatamente acquisiti con uno strumento portatile (SCiO) campioni provenienti dal Mediterraneo di spigole selvagge o allevate. Gli spettri NIR da 740 a 1070 nm sono stati analizzati con i quattro algoritmi: "Processed", "Normalize", "Processed & Normalize" e "(log)R & Normalize" presenti nell'applicazione dello strumento SCiO. I risultati ottenuti dai modelli sviluppati suggeriscono che questo approccio è in grado di distinguere le due categorie di prodotti con elevata sensibilità (100%) e specificità (90%). In conclusione, questo studio evidenzia la potenziale applicazione della spettroscopia NIR per discriminare rapidamente e facilmente i pesci allevati da quelli selvaggi e quindi individuare le frodi commerciali nel campo della produzione della spigola.

Keywords: branzini, frodi, pesce allevato, pesce selvaggio

Ringraziamenti: Questo studio è stato supportato dal finanziamento ricevuto dal Ministero della salute IZSPLV 04-23 - RC.

P3: Development of an easy and fast method to rapidly discriminate wild from farmed fish by NIR spectroscopy

The nutritional and quality attributes of fish make it an excellent product recommended for human health. However, as the world wild fish stocks are limited and the market demand increased over recent decade, fish farming developed in order to offer an alternative and to reduce costs for consumers. The sale of farmed as wild fish is a fraudulent practice, thus requiring the development of methods, based on sensitive, rapid and low-cost techniques, in order to protect consumers from commercial frauds and to ensure food traceability. Consumers often do not have instruments or competence to visually discriminate if a product corresponds to what is indicated on the label, therefore a specific control to protect them from commercial fraud is desirable. European sea bass (*Dicentrarchus labrax* L.) is one of the most economically important fish species in the Mediterranean Sea area. Despite strict requirements regarding indications of production method (wild/farmed), incorrect labelling of sea bass is a practice still frequently detected. The aim of this study was to evaluate the capabilities of Near-InfraRed (NIR) spectroscopy to discriminate sea bass according to the production method. Samples from Mediterranean of wild or farmed Sea Bass were bought and immediately acquired with handled SCiO instrument. NIR spectra from 740 to 1070 nm were analysed with the four pre-defined algorithms: “Processed”, “Normalize”, “Processed & Normalize”, and “(log)R & Normalize”) present in the SCiO instruments. The results achieved by the developed models suggest that this approach was able to distinguish the two product categories with high sensitivity (100%) and specificity (90%). In conclusion, this study highlights the potential application of NIR spectroscopy to quickly and easily discriminate farmed from wild fish and thus detect commercial fraud in the field of sea bass production.

Keywords: sea bass, food frauds, wild fish, farmed fish

Acknowledgements: This study was supported by the Italian Ministry of Health, under Grant nr. IZSPLV 04-23 - RC.

Riferimenti:

- FAO FAO. 2020. The State of World Fisheries and Aquaculture 2020. Sustainability in Action. Rome. <https://doi.org/10.4060/ca9229en>; 2020
- Bjørndal, T. and Guillen, J., 2018. Market integration between wild and farmed fish in Mediterranean Countries. *FAO Fisheries and Aquaculture Circular*, (C1131), pp.1-98.
- Ghidini, S., Varrà, M.O., Dall'Asta, C., Badiani, A., Ianieri, A. and Zanardi, E., 2019. Rapid authentication of European sea bass (*Dicentrarchus labrax* L.) according to production method, farming system, and geographical origin by near infrared spectroscopy coupled with chemometrics. *Food chemistry*, 280, pp.321-327.

P4: Acquafotomica e spettroscopia di riflettanza risolta nel tempo: due tecniche a confronto per individuare la vitrescenza interna in frutti di melo

Marina Buccheri¹, Rosita Caramanico¹, Virginia Ughini², Alessandro Torricelli^{3,4}, Lorenzo Spinelli⁴, Maristella Vanoli¹

¹ CREA - Centro di ricerca Ingegneria e Trasformazioni agroalimentari, Via Venezzan 26, 20133 Milano, Italia, marina.buccheri@crea.gov.it

² Già Dipartimento di Scienze delle Produzioni Vegetali Sostenibili-Facoltà di Scienze Agrarie Alimentari ed Ambientali-Università Cattolica S.C., Piacenza, Italia

³ Politecnico di Milano, Dipartimento di Fisica, piazza Leonardo da Vinci 32, 20133 Milano, Italia

⁴ Istituto di Fotonica e Nanotecnologie, CNR-IFN, piazza Leonardo da Vinci 32, 20133 Milano, Italia

Alcune cultivar di melo sono soggette a vitrescenza, una fisiopatia caratterizzata dalla presenza nella polpa di aree traslucide che rendono il frutto non commerciabile. Il rilevamento rapido e non distruttivo della vitrescenza potrebbe incrementare la qualità al consumo e ridurre le perdite post-raccolta. In questo lavoro sono stati utilizzati due differenti approcci per individuare la vitrescenza: l'acquafotomica e la spettroscopia di riflettanza risolta nel tempo (TRS).

L'acquafotomica si propone di studiare le modificazioni del profilo di assorbimento dell'acqua in 12 lunghezze d'onda (WAMACS: water matrix coordinates) dello spettro NIR allo scopo di ottenere informazioni sulle molecole presenti nei sistemi biologici. Il TRS utilizza un impulso di luce laser per stimare i coefficienti di assorbimento (μ_a), legati alla presenza di composti chimici, e i coefficienti di scattering (μ_s), legati alla struttura del frutto.

Duecento mele 'Pomella Genovese', conservate per un mese a 1 °C, sono state misurate con NIR e TRS in quattro punti opposti lungo la linea equatoriale del frutto; i frutti sono stati poi tagliati per valutare in ogni punto la presenza o meno di tessuto vitrescente.

Applicando la PLS-DA (partial least square-discriminant analysis) alle WAMACS, è stato sviluppato un modello che ha permesso di distinguere i tessuti sani da quelli vitrescenti con una percentuale di corretta classificazione (CCR) dell'87,5% in cross validazione (CV) e del 90,75% in predizione. Il modello PLS-DA costruito sui dati TRS ha portato ad un CCR del 93% in CV e del 92,8% in predizione. Applicando la PLS-DA su entrambi i set di dati si raggiunge un CCR del 92,4% in CV e del 93,7% in predizione. Sia l'acquafotomica che il TRS si sono rivelati buoni sistemi di screening per individuare la vitrescenza in modo non distruttivo; tuttavia, in virtù della maggior profondità raggiunta all'interno della polpa, il TRS ha dato i migliori risultati.

Parole chiave: Analisi discriminante, *Malus domestica*, acquafotomica, TRS, conservazione.

P4: Aquaphotomics and time-resolved reflectance spectroscopy: finding the best approach to non-destructive detection of internal watercore in apple fruits

Some apple cultivars can develop watercore, a physiological disorder characterized by translucent areas in the flesh that make the fruit unmarketable. Rapid and non-destructive detection of watercore could enhance apple quality for consumers and reduce post-harvest losses. This study employed two methods to identify watercore in apples: aquaphotomics and time-resolved reflectance spectroscopy (TRS).

Aquaphotomics is a discipline based on NIR spectroscopy that aims to study the changes in the water absorption profile at 12 specific wavelengths (WAMACS = water matrix coordinates) in order to obtain information about other molecules in biological systems.

TRS uses a laser light pulse to estimate absorption coefficients (μ_a) that are related to the presence of chemical compounds, and scattering coefficients (μ_s) that are related to the structure of the fruit.

Two hundred 'Pomella Genovese' apples, stored for one month at 1 °C, were measured with NIR and TRS at four opposite points along the equatorial line of the fruit; the fruits were then cut to assess whether the tissue was healthy or watercore-affected at each point.

Through the application of PLS-DA (partial least square discriminant analysis) to the WAMACS, a model was developed to discriminate apple healthy tissue from watercore-affected one. The model achieved a correct classification rate (CCR) of 87.5% in cross-validation and 90.75% in prediction. Furthermore, the PLSDA model developed using TRS data resulted in a CCR of 93% in cross-validation and 92.8% in prediction. When PLSDA was applied to both data sets, it achieved a CCR of 92.4% in cross-validation and 93.7% in prediction.

Both aquaphotomics and time-resolved reflectance spectroscopy proved to be effective screening systems for non-destructive detection of watercore; however, due to the greater depth reached within the flesh, TRS gave the best results.

Keywords: Discriminant analysis, *Malus domestica*, aquaphotomics, TRS, storage.

P5: Valutazione della senescenza di lattuga di IV gamma mediante imaging

Sara Vignati, Alessio Tugnolo, Alessia Pampuri, Valentina Giovenzana, Riccardo Guidetti e Roberto Beghi

Dipartimento di Scienze Agrarie e Ambientali - Produzione, Territorio, Agroenergia (DiSAA), Università degli Studi di Milano, Via Celoria 2, 20133, Milano, Italia, alessio.tugnolo@unimi.it

I prodotti di IV gamma sono molto apprezzati dai consumatori per il loro contenuto di nutrienti e composti antiossidanti. Tuttavia, questi prodotti non sono stabili nel tempo, subendo alterazioni nell'aspetto e nel valore nutrizionale a causa dei processi metabolici che si instaurano nelle fasi di pre- e post-raccolta (Vignati et al., 2023). Questo decadimento è ulteriormente accelerato da alcune operazioni del processo produttivo, come il lavaggio e il taglio, portando a una minore conservabilità e a un aumento degli scarti alimentari.

Pertanto, è necessario sviluppare e introdurre lungo la filiera produttiva metodi rapidi e non distruttivi per la valutazione della senescenza dei prodotti di IV gamma. Basandosi sui precedenti studi di Beghi et al. (2016) e Cavallo et al. (2018), sono state effettuate prove di acquisizione di immagini su lattuga di IV gamma confezionata. Le immagini sono state raccolte in camera oscura, utilizzando una board PCB equipaggiata con telecamera monocromatica NIR con sensore CMOS da 1.3 MP (IDS, UI-5244LE-NIR-GL-MB Rev.1.2) posizionata a 75 cm dalla busta di insalata, e diverse sorgenti luminose collocate a 45 cm dal campione (due lampade alogene, due LED a infrarossi con emissione a 850 nm e LED indirizzabili tra 450-700 nm circa). Le immagini ottenute sono state successivamente analizzate per valutare l'andamento della senescenza del prodotto e le potenzialità della telecamera. L'obiettivo è sviluppare un prototipo a basso costo che possa essere utilizzato da operatori e rivenditori come strumento di supporto per la gestione dei prodotti di IV gamma, riducendo gli sprechi alimentari e soddisfacendo le aspettative dei consumatori.

Parole chiave: Imaging, IV gamma, senescenza, spreco alimentare, prototipo.

P5: Assessment of fresh-cut lettuce decay by imaging

Fresh-cut products are highly valued by consumers for their rich nutrient content and antioxidant compounds. However, they are prone to deterioration over time, affecting both their nutritional value and appearance. This instability is largely due to metabolic processes occurring during pre- and post-harvest phases (Vignati et al., 2023). Additionally, certain production operations, such as washing and cutting, further accelerate the decay process, leading to a shorter shelf life and increased food waste.

Consequently, there is a pressing need to develop rapid and non-destructive methods for evaluating the senescence of fresh-cut products throughout the production chain. Building on previous research by Beghi et al. (2016) and Cavallo et al. (2018), image acquisition tests were conducted on packaged fresh-cut lettuce. These tests were performed in dark room using a PCB board equipped with a monochromatic NIR camera (IDS, UI-5244LE-NIR-GL-MB Rev.1.2) with a CMOS sensor (1.3 MP) positioned at 75 cm from the salad bag, and various light sources (two halogen lamps, two infrared LEDs (850 nm), and addressable LEDs (450-700 nm)) placed 45 cm from the sample. The captured images were analyzed to assess the decay trend of the product and evaluate the camera's potential for developing a low-cost prototype. This prototype aims to assist operators and retailers in managing fresh-cut products more effectively, thereby reducing food waste and meeting consumer expectations.

Keywords: Imaging, fresh-cut, decay, food waste, prototype.

Riferimenti:

- Vignati, S., Tugnolo, A., Giovenzana, V., Pampuri, A., Casson, A., Guidetti, R. and Beghi, R., 2023. Hyperspectral Imaging for Fresh-Cut Fruit and Vegetable Quality Assessment: Basic Concepts and Applications. *Applied Sciences*, 13(17), p.9740.
- Beghi, R., Giovenzana, V., Civelli, R. and Guidetti, R., 2016. Influence of packaging in the analysis of fresh-cut *Valerianella locusta* L. and Golden Delicious apple slices by visible-near infrared and near infrared spectroscopy. *Journal of Food Engineering*, 171, pp.145-152.
- Cavallo, D.P., Cefola, M., Pace, B., Logrieco, A.F. and Attolico, G., 2018. Non-destructive automatic quality evaluation of fresh-cut iceberg lettuce through packaging material. *Journal of Food Engineering*, 223, pp.46-52.

P6: Applicazione della spettroscopia NIR per la tracciabilità geografica e varietale del grano

Consuelo Giustizieri¹, Massimo Reverberi¹, Cesare Manetti¹, Federico Marini²

¹ Dip. Biologia Ambientale, Università di Roma La Sapienza, P. le Aldo Moro 5, 00185 Roma, consuelo.giustizieri@uniroma1.it

² Dip. Chimica, Università di Roma La Sapienza, P. le Aldo Moro 5, 00185 Roma

I cereali sono la principale fonte di calorie per l'uomo sin dall'inizio dell'agricoltura; il frumento è una delle piante coltivate più antiche. L'accoppiamento della spettroscopia nel vicino infrarosso (NIR) con tecniche chemiometriche di classificazione è stato utilizzato per discriminare varietà e tracciare campioni di grano. La tracciabilità promuove la sicurezza e la tipicità delle filiere agroalimentari. Il campionamento ha coinvolto 11 regioni italiane e 2 paesi esteri, tra giugno e luglio 2023 e ha preso in considerazione 23 varietà tra grano duro e tenero. Gli spettri sono stati registrati sulle singole cariossidi in modalità di riflessione. Il modello PLS-DA costruito per la discriminazione tra tutte le varietà ha mostrato un'accuratezza sul test set circa del 75%. L'analisi degli indici V.I.P. ha mostrato che le zone spettrali da 4900 a 5800 cm^{-1} e da 6800 a 7200 cm^{-1} sono importanti per la differenziazione. Integrando i dati NIR con i dati MIR attraverso un modello SO-PLS-LDA, la capacità predittiva è migliorata, superando l'82%. Sono stati quindi costruiti modelli individuali per le singole varietà attraverso l'algoritmo SIMCA, ottenendo un'elevata sensibilità e specificità per la maggior parte delle categorie, con valori di efficienza in molti casi superiori all'85/90%. Gli spettri NIR, quindi, contengono informazioni utili per discriminare campioni di grano di diverse varietà. Tuttavia, questi risultati necessitano di ulteriori convalide dai campionamenti futuri.

Parole chiave: grano, varietà, tracciabilità, classificazione, PLS-DA, SIMCA

Ringraziamenti: Gli autori ringraziano per il finanziamento ricevuto dal progetto *Agritech* (B83C22002920007) e per il supporto ricevuto dall'infrastruttura di ricerca *METROFOOD-IT* (I83C22001040006)

P6: Application of NIR spectroscopy for geographic and varietal traceability of wheat

Cereals have been the main source of calories for humans since the beginning of agriculture; wheat is one of the oldest cultivated plants. Near-infrared (NIR) spectroscopy with chemometric classification techniques have been used to discriminate varieties and trace wheat samples. Traceability promotes safety and typicality of agri-food supply chains. The sampling involved 11 Italian regions and 2 foreign countries between June and July 2023 and considered 23 varieties including durum and soft wheat. Spectra were recorded on individual caryopses in reflection mode. The PLS-DA model constructed for discrimination among all varieties showed an accuracy on the test set of about 75%. Analysis of V.I.P. indices showed that the spectral zones from 4900 to 5800 cm^{-1} and 6800 to 7200 cm^{-1} are important for differentiation. By integrating NIR data with MIR data through a SO-PLS-LDA model, the predictive ability improved, exceeding 82%. Individual models were then constructed for individual varieties through the SIMCA algorithm, achieving high sensitivity and specificity for most categories, with efficiency values in many cases exceeding 85/90%. The NIR spectra, therefore, contain useful information for discriminating different varieties of wheat samples. However, these results need further validation from future samplings.

Keywords: wheat, varieties, traceability, classification, PLS-DA, SIMCA

Acknowledgements: the authors are grateful for the funding received from the *Agritech* project (B83C22002920007) and for the support received from the *METROFOOD-IT* research infrastructure (I83C22001040006)

Riferimenti:

- Cozzolino, D., 2014. An overview of the use of infrared spectroscopy and chemometrics in authenticity and traceability of cereals. *Food Research International*, 60, pp.262-265.
- González-Martín, M.I., Moncada, G.W., González-Pérez, C., San Martín, N.Z., López-González, F., Ortega, I.L. and Hernández-Hierro, J.M., 2014. Chilean flour and wheat grain: Tracing their origin using near infrared spectroscopy and chemometrics. *Food chemistry*, 145, pp.802-806.

P7: Predizione del contenuto aminoacidico in additivi nutrizionali utilizzati nell'industria avicola mediante spettrometria NIR

Aleksandra Zivanovic, Stefano Pigaiani*

Fanin spa Via Fondo Muri, 43, 36034 San Tomio di Malo (VI), *stefano.pigaiani@faninmangimi.it

Gli amminoacidi essenziali sono componenti fondamentali nei mangimi con conseguenze sulla salute, benessere e crescita animale. In particolare, i tacchini di giovane età guadagnano peso in risposta alla disponibilità di metionina, treonina e lisina. Di conseguenza, quando necessario, tali amminoacidi vengono addizionati tramite integratori alimentari.

Il presente studio ha come scopo indagare il possibile utilizzo dello spettrofotometro NIR per la predizione della concentrazione di questi tre amminoacidi negli integratori. Durante lo studio, per ogni campione è stato determinato il profilo aminoacidico tramite analisi chimica da un laboratorio esterno.

Per sviluppare le curve di calibrazione, sono stati impiegati 78 campioni di lisina, 79 campioni di metionina e 119 campioni di treonina, con rispettivamente concentrazioni comprese tra 1.7-37%, 2-87% e 9-100%. Per ogni campione è stato acquisito lo spettro nel range di 4000-10000 cm^{-1} nm e 2/3 degli spettri per ciascun integratore sono stati utilizzati per la curva di calibrazione (C-set), il restante (1/3) invece per la validazione della curva di calibrazione (V-set). È stato applicato il metodo PLS, assieme a un pretrattamento dei dati, grazie al software NIRCal 5.0 e la funzione Wizard, ottenendo una predizione con coefficienti di regressione superiori al 0.9 per ciascun amminoacido, una consistenza di circa 100 e un Q value di circa 1.

Dopo lo sviluppo e la validazione della curva di calibrazione, sei campioni diluiti al 50% sono stati utilizzati per predire il loro profilo aminoacidico. I dati chimici ottenuti dal laboratorio esterno e i dati predetti dal NIR risultano essere statisticamente significativi con il test T di Student con un intervallo di confidenza al 95%.

In conclusion, the results obtained demonstrate the effectiveness of NIR in the quantification of amino acids in supplements as an alternative to more complex analytical methods.

Parole chiave: avicoli, NIR, amminoacidi essenziali, integratori, allevamento

P7: Prediction of amino acid content in nutritional additives used in the poultry industry by NIR spectrometry

Essential amino acids are critical components in animals' feeds with consequences on animals' health, growth and behaviour. Specifically, young turkeys gain weight in response to methionine, threonine, and lysine availability. Therefore, when needed, those amino acids are added to supplement the aminoacidic deficiency in turkeys' diets (Center for Food Security and Public Health, 2013).

This study investigated the potential of using NIR spectrophotometer for the prediction of the three aminoacidic concentration in nutritional additives. During the study, all the samples were analysed by an external laboratory to determine the aminoacidic concentration.

In order to develop the calibration curves, 78 samples of Lysine, 79 samples of methionine and 119 samples of threonine with concentrations, respectively, between 1.7-37%, 2-87%, and 9 to 100% were prepared. For each sample, the spectrum was acquired in the range of 4000-10000 cm^{-1} nm and 2/3 of the spectra for each integrator were used for the calibration curve (C-set), the remaining (1/3) instead for validation of the calibration curve (V-set). The PLS method, combined with a pre-treatment of the original spectra, using the software NIRCal 5.0 and the Wizard function, resulted in a satisfactory prediction obtaining the regression coefficient above 0,9 for each amino acid, a consistency near 100 and a Q-value of approximately 1.

After the development and validation of the calibration curves, six samples diluted at 50% were analysed in order to predict their amino acid profile. The chemical concentrations determined by an external laboratory and the NIR values were statistically analysed using a Student T test, obtaining a significant correlation between the reported data (with a confidence of 95%).

In conclusion, the results obtained demonstrate the effectiveness of NIR in the quantification of amino acids in supplements as an alternative to more complex analytical methods.

Keywords: poultry industry, NIR, essential amino acids, nutritional additives

Riferimenti:

Center for Food Security and Public Health, Iowa State University of Science and Technology, College of Veterinary Medicine. (2013). *The Foreign Animal Disease Preparedness and Response Plan (FAD PReP)/National Animal Health Emergency Management System (NAHEMS) Guidelines*.

Parsons, C.M., 2020. Unresolved issues for amino acid digestibility in poultry nutrition. *Journal of Applied Poultry Research*, 29(1), pp.1-10.

P8: Monitoraggio della conservazione del caffè macinato

Federica De Agostini¹, Silvia Grassi¹, Sara Limbo¹, Susanna Buratti¹, Simona Benedetti¹, Serena Gobbi¹, Chiara Margarone², Giulia Cusanno², Daniela Gagliardi², Cristina Alamprese¹

¹ DeFENS, Department of Food, Environmental and Nutritional Sciences, University of Milan, Milan, Italy, federica.deagostini@unimi.it

² Luigi Lavazza S.p.A., 10156 Turin, Italy

La qualità del caffè macinato è soggetta a decadimento in conservazione a causa di molteplici fenomeni che possono influenzare il sapore e l'aroma del caffè erogato e che convenzionalmente sono valutati mediante analisi sensoriale. Tuttavia, questo approccio richiede alti investimenti economici e di tempo, generando la necessità di esplorare altre metodologie. In questo contesto, lo studio presentato indaga mediante spettroscopia FT-NIR i cambiamenti qualitativi che si verificano nel caffè (*Coffea arabica*) macinato durante prove di conservazione in condizioni accelerate.

Confezioni di caffè macinato da 250 g sono state aperte e conservate a diverse temperature (25°C, 37°C e 45°C), con un'umidità relativa (UR) del 55%, per un periodo di 42 giorni. Gli spettri FT-NIR del caffè macinato sono stati raccolti nell'intervallo 12.500-4.500 cm⁻¹, in riflettanza diffusa mediante sfera integratrice in rotazione a tempi predefiniti dopo il condizionamento della temperatura. Ulteriori valutazioni hanno riguardato l'attività dell'acqua e l'umidità, oltre all'analisi sensoriale del caffè estratto mediante moka.

L'analisi delle componenti principali (PCA) degli spettri FT-NIR ha mostrato una distribuzione dei campioni influenzata sia dalla temperatura che dal tempo di conservazione, principalmente correlata alla modifica del segnale dell'acqua e della frazione lipidica. I punteggi normalizzati di PC1 in funzione del tempo hanno evidenziato una cinetica di modificazione più rapida per i caffè conservati a 45°C rispetto a quelli esposti a temperature più basse. Quanto osservato è in accordo con i risultati ottenuti per umidità, attività dell'acqua e analisi sensoriale.

Poiché l'accettabilità sensoriale per l'attributo "ossidazione" è stata superata entro la prima settimana di conservazione, sono previste ulteriori indagini per monitorare le alterazioni del caffè in un arco di tempo più ristretto.

Parole chiave: shelf life, FT-NIR, PCA, analisi sensoriale

Ringraziamenti: Luigi Lavazza S.p.A. (Turin, Italy)

P8: Monitoring of ground coffee quality during storage

Ground coffee is subjected to deterioration over storage time, leading to changes affecting flavour and aroma of the brewed coffee, which are conventionally evaluated by sensory analysis. Nevertheless, this approach presents the drawback of being time- and cost-consuming, thus requiring the evaluation of other methodologies. In this context, the study investigates quality changes occurring in ground coffee (*Coffea arabica*) under accelerated shelf-life tests.

Ground coffee packages (250 g) were opened and stored at different temperatures (25 °C, 37 °C and 45 °C), with a constant relative humidity (RH) of 55%, over a 42-day period. FT-NIR spectra of ground coffee were collected in the range 12,500 - 4,500 cm⁻¹ in diffuse reflectance by an integration sphere in rotation after temperature conditioning. Additional evaluations included water activity and moisture of coffee grounds as well as sensory analysis of the extracted coffee.

Principal component analysis (PCA) of the FT-NIR spectra showed a sample distribution affected by both storage temperature and time, mainly related to water and lipid signal modification. Normalized PC1 scores as a function of time highlighted a faster modification kinetics for the coffee bags stored at 45 °C compared to those kept at lower temperatures. The observed changes agreed with the results obtained for moisture, water activity and sensory analysis.

Since the sensory acceptability in terms of “oxidation” attribute was exceeded within the first week of storage, further investigations are envisioned to monitor coffee alterations within a shorter timeframe.

Keywords: Coffee Shelf life, FT-NIR, PCA, Sensory Analysis

Acknowledgements: Luigi Lavazza S.p.A. (Turin, Italy)

P9: Studio di fattibilità dell'impiego di un NIR portatile per la determinazione del contenuto di proteine in campioni di grano in un contesto industriale

Caterina Durante¹, Marina Cocchi¹, Alessandro D'Alessandro¹, Barbara Giussani², Mattia Pietropaolo¹, Lorenzo Strani¹

¹ Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, Università degli studi di Modena e Reggio Emilia, caterina.durante@unimore.it

² Dipartimento di Scienza e Alta Tecnologia, Università degli Studi dell'Insubria, Como, Italy

Il rapido sviluppo della strumentazione NIR e della sua miniaturizzazione unitamente ai sistemi di comunicazione wireless e di algoritmi evoluti dedicati all'elaborazione statistica dei dati, ha permesso di sviluppare applicazioni diversificate in moltissimi ambiti. Tuttavia, nello sviluppo di modelli di calibrazione ottenuti dall'analisi di segnali acquisiti da strumenti NIR portatili, è estremamente importante considerare diversi aspetti. In particolare, il metodo di acquisizione del segnale (continuo o puntuale), la riproducibilità delle misure (intra-sessione e inter-sessione), la scelta del metodo di pretrattamento dei segnali e le procedure robuste di validazione richiedono indagini mirate per garantire l'accuratezza e l'affidabilità dei modelli sviluppati. Sulla base di queste considerazioni, in questa attività di ricerca l'obiettivo è stato quello di realizzare uno studio di fattibilità per valutare le prestazioni di uno strumento NIR portatile nello sviluppo di modelli di calibrazione robusti per la determinazione del contenuto di proteine in campioni di grano. Sono stati analizzati cento campioni di grano provenienti da diverse regioni italiane (Umbria, Lazio, Toscana, Sicilia, Campania, Puglia e Molise). Gli spettri NIR sono stati acquisiti tra 900 e 1700 nm utilizzando uno strumento portatile poliSPEC NIRE (ITPhotonics S.r.l., Fara Vicentino, Italia) senza alcun tipo di pretrattamento del campione. L'acquisizione dei segnali NIR è stata effettuata in due modalità: a punto singolo e continua. Le diverse matrici di segnali NIR sono state analizzate mediante Analisi delle Componenti Principali, che ha permesso di selezionare il miglior pretrattamento dei segnali e di eliminare i campioni outlier. Infine, i dati sono stati suddivisi in set di calibrazione e di validazione e sono stati sviluppati dei modelli di regressione PLS in grado di quantificare le relazioni esistenti tra il contenuto di proteine e le lunghezze d'onda acquisite. Questo studio potrebbe avere un'ampia applicabilità nell'industria, dove l'implementazione di questa tecnologia direttamente nelle linee di lavorazione sarebbe di grande interesse per accelerare i processi di monitoraggio delle materie prime e aumentare contemporaneamente il numero di campioni analizzati.

Parole chiave: NIR portatile, analisi delle componenti principali, modelli di regressione, grano, contenuto proteico

P9: A feasibility study of portable NIR for protein content determination in grain samples in an industrial context

Due to the rapid development and miniaturization of NIR instruments, advances in wireless communication systems, and sophisticated data analysis algorithms, NIR spectroscopy has found application in a wide range of fields. However, in the development of calibration models for portable NIR data, it is of utmost importance to consider several issues compared to traditional instruments (Giussani et al., 2022). In particular, the method of signal acquisition (continuous or single-point), the reproducibility of measurements (intra-session and inter-session), the choice of pre-processing method to handle noise and interference, and rigorous validation procedures require careful consideration to ensure the accuracy and reliability of the model. Taking into account these considerations, in the present research activity, the goal was to carry out a feasibility study to evaluate the performance of portable NIR instrument in developing robust calibration models for the determination of protein content in grain samples. One hundred wheat samples, from different origins (Umbria, Lazio, Toscana, Sicilia, Campania, Puglia, and Molise) were investigated. NIR spectra were acquired between 900 and 1700 nm using a poliSPEC NRe (ITPhotonics S.r.l., Fara Vicentino, Italy) portable instrument without any kind of sample pretreatments. The acquisition of the NIR signals involved two modes, one single-point and one continuous. The different matrices of NIR signals were analyzed by Principal Component Analysis, which allowed selection of the best processing of instrumental signals (capable of eliminating spectral interference such as baseline and background shifts) and elimination of outlier samples. Finally, the data were divided into calibration and validation sets, and Partial Least Squares regression models were developed in order to quantify the relationships between protein content and the acquired wavelengths. This study could have broad applicability in industry, where the implementation of this technology directly in processing lines would be of great interest to speed up raw material monitoring processes and simultaneously increase the number of samples analyzed.

Keywords: portable NIR, principal component analysis, regression model, grain, protein content

Riferimenti:

Giussani, B., Gorla, G. and Riu, J., 2024. Analytical chemistry strategies in the use of miniaturised NIR instruments: An overview. *Critical Reviews in Analytical Chemistry*, 54(1), pp.11-43.

P10: Monitoraggio della composizione del formaggio mediante spettroscopia NIR portatile e Optimized iPLS

Arnaud Molle¹, Giorgia Stocco¹, Giovanni Niero², Mauro Penasa², Paolo Berzaghi², Andrea Summer¹, Claudio Cipolat-Gotet¹

¹ Dipartimento di Scienze Medico-Veterinarie, Università degli Studi di Parma, 43126 Parma, Italia.

arnaudpaulj.molle@unipr.it

² Dipartimento di Agronomia Animali Alimenti Risorse Naturali e Ambiente - DAFNAE, Università degli Studi di Padova, 35020 Legnaro, Italia

³ Dipartimento di Medicina Animale, Produzioni e Salute -MAPS, Università degli Studi di Padova, 35020 Legnaro, Italia

Il contenuto di grasso, proteina e umidità sono fattori chiave da monitorare durante la stagionatura del formaggio. I metodi attuali creano un ritardo tra la misurazione e i risultati dell'analisi. Si stanno sviluppando sensori portatili non distruttivi per consentire la misurazione in linea di queste caratteristiche. Questo lavoro esplora un metodo rapido e non distruttivo per predire questi caratteri di composizione utilizzando la spettroscopia del vicino infrarosso (NIR). In totale, sono stati raccolti 1.080 campioni di latte di singola bovina tra febbraio 2021 e aprile 2022 processati in formaggio usando una metodica di laboratorio (Cipolat-Gotet et al., 2013). Dopo 60 giorni di stagionatura, la composizione è stata misurata utilizzando un FoodScan (FOSS, Danimarca). Gli spettri NIR sono stati raccolti utilizzando uno spettrometro portatile Aurora (GraNit, Italia) che copre il range spettrale tra 950 e 1650 nm, ogni 2 nm. Per identificare la regione spettrale più informativa degli spettri e personalizzare il pretrattamento spettrale (derivata, scaling e/o correzione della baseline) è stata applicata un'*Interval Partial Least Square regression* (iPLS). L'iPLS utilizza 7 blocchi spettrali di circa 50 lunghezze d'onda ciascuno. I modelli sono stati sviluppati utilizzando una 10-fold *cross validation* per correlare i dati spettrali NIR con la composizione del formaggio. La migliore combinazione (regione spettrale + pretrattamenti) per ogni carattere è stata identificata in base al coefficiente di determinazione in validazione e la root mean square error in predizione (R^2_{VAL} e RMSEP). L'iPLS ha fornito risultati promettenti, con buoni valori di R^2_{VAL} (da 0.83 a 0.92) e RMSEP (3.28, 2.59 e 3.41 per umidità, proteina e grasso). È importante sottolineare che l'iPLS ha ridotto il tempo di calcolo complessivo e offerto calibrazioni specifiche per ogni carattere. L'uso di spettrometri NIR portatili rappresenta una valida soluzione per monitorare le caratteristiche del formaggio durante la stagionatura direttamente a livello di industria casearia.

Keywords: strumenti portatili, caseificazione, chemometria, monitoraggio

P10: Monitoring cheese composition through portable NIR spectroscopy and Optimized iPLS

Fat, protein and moisture are key cheese components to be monitored during cheese curing. Current methods, such as Karl Fischer titration for moisture content, create a time lag between the measurement and results of the analysis. Non-destructive portable sensors are being developed to allow on-line measurement of these traits. The present work explores a fast, low-cost and non-destructive method to predict cheese composition using Near Infrared spectroscopy (NIR). Milk samples from 1,080 cows were collected between February 2021 and April 2022 and processed following a lab model cheese (Cipolat-Gotet et al., 2013). After 60 days of maturation, the composition (fat, protein and humidity) was measured using a benchtop FoodScan (FOSS, Denmark). Spectra were collected using the Aurora portable spectrometer (GraiNit, Italy) that covers the NIR range between 950 and 1,650 nm, every 2 nm. After spectra smoothing, an Interval Partial Least Square regression (iPLS) was applied to identify the most informative spectral regions and tailor spectral pre-treatment (derivative, scaling and/or baseline correction). The iPLS used 7 spectral blocks of approximately 50 wavelengths each. Models were developed using 10-fold cross-validation to correlate NIR spectral data with cheese composition. The best combination (spectral region + pre-treatments) for each trait was identified based on the coefficient of determination in validation and root mean square error of prediction (R^2_{VAL} and RMSEP). Predicting models yielded promising results, with R^2_{VAL} from 0.83 to 0.92 and RMSEP of 3.28, 2.59 and 3.41 for moisture, protein and fat, respectively. Importantly, iPLS reduced overall computation time and offered trait-specific calibrations. The use of handheld NIR spectrometer could be generalized for the monitoring of cheese seasoning, offering a strategic tool to be used directly at the dairy industry level.

Keywords: Handheld equipment, cheese-making, chemometrics, monitoring

Riferimenti:

Cipolat-Gotet, C., Cecchinato, A., De Marchi, M. and Bittante, G., 2013. Factors affecting variation of different measures of cheese yield and milk nutrient recovery from an individual model cheese-manufacturing process. *Journal of Dairy Science*, 96(12), pp.7952-7965.

P11: Applicazione della spettroscopia NIR nella filiera del caffè

Daniela Gagliardi¹, Alberto Mazzoleni², Carolina Scagliarini², Nicola Cavallini³,
Eugenio Alladio², Alberto Cabilli¹, Raffaella Ceccarelli¹

¹ Luigi Lavazza S.p.A., Strada Settimo 410, 10154, Torino

² Università di Torino, Dipartimento di Chimica, Via Pietro Giuria 7, 10125, Torino,
alberto.mazzoleni@unito.it

³ Politecnico di Torino, Dipartimento di Scienza Applicata e Tecnologia, Corso Duca degli Abruzzi 24,
10129, Torino

In questo lavoro viene presentata una ricerca svolta presso la Factory 1895 di Lavazza, una recente realtà che combina innovazione e autenticità nel mondo dell'industria del caffè. L'obiettivo dello studio è quello di valutare l'utilizzo della spettroscopia NIR in una fase cruciale della filiera produttiva del caffè: il controllo del caffè crudo. La spettroscopia NIR si rivela particolarmente adatta per questa applicazione grazie alla possibilità di condurre analisi rapide, non distruttive e con una semplice preparazione del campione. Il suo impiego, infatti, può consentire di discriminare i chicchi di caffè ottimali da quelli che presentano imperfezioni, contribuendo così a garantire un elevato standard di qualità nel prodotto finale.

In questo studio è stato utilizzato uno spettrometro NIR da banco (Thermo Nicolet Antaris II FT-NIR di ThermoFisher) per raccogliere i dati spettrali dei campioni di caffè crudo. Le analisi sono state condotte attraverso l'utilizzo di metodi chemiometrici "unsupervised" come la PCA (Principal Component Analysis) che ha permesso di visualizzare le differenze tra chicchi sani e quelli che presentano difetti. (Santos et al., 2012)

I risultati dello studio hanno dimostrato che la spettroscopia NIR è particolarmente efficace nell'analisi chimico-fisica del caffè crudo. Questo approccio non solo può portare ad importanti miglioramenti nelle fasi di controllo qualità, ma riduce anche tempi e costi associati ai metodi di analisi tradizionali. Inoltre, la spettroscopia NIR permette di monitorare la qualità del caffè lungo tutta la catena produttiva, dal chicco crudo al prodotto finale.

Parole chiave: caffè, qualità, chemiometria, PCA

P11: Application of NIR spectroscopy in the coffee production chain

In this work, research conducted at Lavazza's Factory 1895 is presented. This recent establishment combines innovation and authenticity in the world of the coffee industry. The study aims to evaluate the use of NIR spectroscopy at a crucial stage of the coffee production chain: the inspection of raw coffee. NIR spectroscopy proves to be particularly suitable for this application due to its ability to perform rapid, non-destructive analyses with simple sample preparation. Its use can, in fact, allow the discrimination of optimal coffee beans from those with imperfections, thereby helping to ensure a high-quality final product.

In this study, a bench-top NIR spectrometer (Thermo Nicolet Antaris II FT-NIR by ThermoFisher) was used to collect spectral data of raw coffee samples. The analyses were conducted using unsupervised chemometric methods such as PCA (Principal Component Analysis), which allowed for the visualization of differences between healthy beans and those with defects. (Santos et al., 2012)

The results of the study demonstrated that NIR spectroscopy is particularly effective in the chemical-physical analysis of raw coffee. This approach can not only lead to significant improvements in quality control phases but also reduces the time and costs associated with traditional analysis methods. Furthermore, NIR spectroscopy allows for monitoring the quality of coffee throughout the entire production chain, from the raw bean to the final product.

Keywords: coffee, quality, chemometrics, PCA

Riferimenti:

Santos, J.R., Sarraguça, M.C., Rangel, A.O. and Lopes, J.A., 2012. Evaluation of green coffee beans quality using near infrared spectroscopy: A quantitative approach. *Food Chemistry*, 135(3), pp.1828-1835.

P12: La spettroscopia vis/NIR come *green technology*: quantificazione tramite LCA dei benefici ambientali, il caso studio delle analisi di qualità dell'uva (*Vitis vinifera* L.)

Roberto Beghi, Andrea Casson, Alessia Pampuri, Alessio Tugnolo, Sara Vignati, Riccardo Guidetti, Valentina Giovenzana

Dipartimento di Scienze Agrarie e Ambientali - Produzione, Territorio, Agroenergia (DiSAA). Università degli Studi di Milano, Via Celoria 2, 20133, Milano, Italia, roberto.beghi@unimi.it

Misurando i parametri di qualità dell'uva è possibile determinare il momento ottimale della vendemmia, garantendo la produzione di vini di alta qualità. Questi parametri sono solitamente ottenuti attraverso metodi analitici tradizionali di laboratorio, che implicano l'uso di prodotti chimici. I metodi ottici possono rappresentare un'alternativa adeguata e rapida per monitorare la maturazione tecnologica delle uve.

Lo scopo del lavoro è valutare e confrontare l'impatto ambientale di tre diversi tipi di strumentazione di analisi per valutare parametri tecnologici (contenuto totale di solidi solubili, pH e acidità totale) utilizzando tre diversi approcci: le analisi di laboratorio, un metodo ottico che utilizza un dispositivo vis/NIR da banco e un secondo metodo ottico che utilizza un prototipo vis/NIR compatto ed economico. La metodologia Life Cycle Assessment (LCA) è stata utilizzata per identificare la soluzione più sostenibile in un approccio "dalla culla alla tomba", secondo norma ISO 14040-14044. Come unità funzionale si è considerato il pool delle analisi necessarie per ottenere i tre parametri tecnologici.

Innanzitutto, va sottolineato che le analisi di laboratorio devono essere eseguite con strumenti diversi per ottenere i tre parametri tecnologici, mentre per il vis/NIR da banco e per il prototipo, i tre parametri di qualità possono essere ottenuti con una sola analisi. I risultati evidenziano che l'analisi ottica effettuata con il prototipo vis/NIR ha il minor impatto ambientale, inferiore fino a 3,2 volte rispetto alle analisi di laboratorio. Se un prototipo ottico di basso costo può essere identificato come la soluzione migliore da un punto di vista ambientale, le sue prestazioni potrebbero non essere così affidabili rispetto agli altri strumenti. Per questo motivo è stato incluso un fattore di performance e i risultati sono stati normalizzati, confermando in ogni caso quanto ottenuto nello scenario precedente.

In conclusione, lo studio dimostra come soluzioni ottiche per applicazioni specifiche potrebbero fornire vantaggi sia nel monitorare la qualità dei prodotti agroalimentari in un approccio di industria 4.0, sia nel proporre soluzioni a basso impatto ambientale.

Parole chiave: sostenibilità, strumentazione Vis/NIR, prototipo, maturazione tecnologica, LCA, impatto ambientale

P12: Vis/NIR spectroscopy as a green technology: quantification of environmental benefits by using LCA for the assessment of grape (*Vitis vinifera* L.) quality parameters

By measuring grape quality parameters, it's possible to determine the optimum harvest timing, ensuring the production of high-quality wines. These parameters are usually obtained through traditional analytical methods, implying the use of chemicals. As a solution to destructiveness and slowness problems, optical methods can be suitable alternatives to monitor the technological maturation of grapes.

The aim of the work is to evaluate and compare the environmental impact of three different types of analyses carried out to evaluate technological parameters (total soluble solids content, pH, and total acidity) using three different approaches: the wet-chem method, an optical method using a benchtop vis/NIR device, and a second optical method using an innovative and cost-effective vis/NIR prototype. The Life Cycle Assessment (LCA) methodology was used to identify the most sustainable solution in a "from-cradle-to-grave" approach, according to the ISO 14040-14044 international standards. The functional unit was identified by the execution of the analyses necessary to obtain the three technological parameters.

Results demonstrate how, first, the wet-chem analyses should be carried out in triplicate to obtain technological parameters, while for the vis/NIR benchtop and the innovative prototype, the three quality parameters can be obtained with only one single analysis. Moreover, the optical analysis carried out with the cost-effective prototype results in a solution with a lower impact and is 3.2 times more sustainable than the wet-chem analysis. If an innovative optical prototype can be identified as the best solution, its performance may not be so reliable in obtaining precise and trustworthy results. For this reason, a performance factor was included, and results have been normalized; nevertheless, results confirmed what was obtained in the previous scenario.

In conclusion, the study demonstrates how innovations in agriculture and the development of smart optical solutions could provide advantages both in monitoring the quality of agri-food products in an industry 4.0 approach and in proposing green solutions.

Keywords: Vis/NIR device, prototype, technological maturation, sustainability, LCA, environmental impact

P13: La penetrazione delle radiazioni NIR e XRF nell'imaging spettroscopico: il progetto di ricerca INSIDE

Paolo Oliveri¹, Giorgia Sciotto², Eugenio Alladio³, Sara Gariglio^{1,4}, Cristina Malegori¹, Jocimar da Silva Santos¹, Emilio Catelli², Zelan Li², Alberto Mazzoleni³, Carolina Scagliarini³

¹ Dipartimento di Farmacia (DIFAR), Università di Genova, Viale Cembrano, 4, Genova,
cristina.malegori@unige.it

² Dipartimento di Chimica "G. Ciamician", Università di Bologna, Campus di Ravenna, Via Guaccimanni, 42, Ravenna

³ Dipartimento di Chimica, Università di Torino, Via Pietro Giuria, 5, Torino

⁴ Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale (DCCI), Università di Genova, Via Dodecaneso, 31, Genova

Il progetto di ricerca biennale INSIDE, finanziato dal Ministero dell'Università e della Ricerca - MUR nell'ambito del bando "PRIN 2022", coinvolge tre università italiane: Genova, Bologna e Torino. Il progetto mira a estendere il concetto di imaging iperspettrale (HSI) nei domini spettrali del vicino infrarosso (NIR) e della fluorescenza a raggi X (XRF), da tecnica analitica di superficie a tomografia spettrale 3D. I vantaggi di questa soluzione analitica saranno sfruttati e validati in tre principali ambiti di applicazione: analisi alimentare, patrimonio culturale e scienze forensi. Grazie ad un'analisi sistematica della letteratura, i fattori chiave che influenzano la profondità di penetrazione delle radiazioni NIR e X, nonché le loro interazioni, saranno studiati mediante l'applicazione del disegno multivariato di esperimenti (MDOE). Inoltre, l'applicazione di adeguate tecniche di progettazione del campionamento garantirà la raccolta/preparazione di campioni *ad hoc* per lo sviluppo delle suddette strategie analitiche. Durante le fasi iniziali, campioni con stratigrafia ben definita, verranno progettati e realizzati utilizzando una stampante 3D multimateriale, utilizzando polimeri con profili spettrali distinti. Verranno applicate strategie di deconvoluzione multivariata, tra cui multivariate curve resolution (MCR) e algoritmi di super risoluzione, per raccogliere in modo efficiente informazioni chimiche 3D dai dati iperspettrali. Verranno eseguite analisi di conferma per convalidare i protocolli analitici sviluppati utilizzando la microscopia elettronica a scansione (SEM), la gascromatografia-spettrometria di massa (GC-MS) e la spettrometria di massa tandem con cromatografia liquida ad altissime prestazioni (UHPLC-MS/MS). Verranno implementati strumenti di elaborazione delle immagini per la conversione di informazioni iperspettrali NIR e XRF in mappe chimiche 3D e per la loro rappresentazione grafica, compreso lo sviluppo di un'app autonoma con una interfaccia intuitiva, che sarà distribuita alle parti interessate del progetto per i test, e fungerà da protocollo per casi applicativi in diversi settori della ricerca e dell'industria.

Parole chiave: penetrazione della radiazione, NIR, XRF, imaging, stratigrafia, chemiometria

Ringraziamenti: Sostegno finanziario fornito dal Ministero dell'Università e della Ricerca italiano - MUR (Progetto di ricerca PRIN 2022 n. 20223WBTH8, CUP: D53D23008950006).

P13: Penetration depth in NIR and XRF spectral imaging: the INSIDE research project

The two-year research project INSIDE, funded by the Italian Ministry of Universities and Research - MUR as a frame for the "PRIN 2022" call, involves three Italian universities: Genova, Bologna and Torino. The project is aimed at revolutionising the concept of hyperspectral imaging (HSI) in the near-infrared (NIR) and X-ray fluorescence (XRF) spectral domains, evolving from a surface analytical technique to an in-depth 3D spectral tomography. The impact of such a cutting-edge analytical solution will be exploited and validated in three main application fields: food analysis, cultural heritage, and forensic sciences. After a systematic literature analysis of research studies published on this topic, for a comprehensive recognition of the state of the art, key factors affecting the penetration depth of NIR and X radiations, as well as their interactions, will be investigated by application of multivariate design of experiments (MDOE). Moreover, applying proper sampling design techniques will ensure the collection/preparation of samples capable of guaranteeing maximum representativity and the development of analytical strategies characterised by an effective capacity to address the predetermined targets. During these initial phases, ad hoc samples, with a well-defined stratigraphy, will be designed and built employing a multi-material 3D printer, using polymers with distinct spectral signatures. Multivariate unmixing strategies - including multivariate curve resolution (MCR) and super-resolution algorithms - will be applied for efficiently gathering 3D chemical information from hyperspectral data. Confirmatory analyses will be performed to validate the analytical protocols developed by using scanning electron microscopy (SEM), gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) and ultra-high performance liquid chromatography tandem mass spectrometry (UHPLC-MS/MS). Suitable tools for 3D graphics will be implemented for the conversion of deconvoluted NIR and XRF hyperspectral information into 3D chemical maps, including the development of a stand-alone app with a user-friendly GUI, which will be distributed to the project stakeholders for testing, and will demonstrate the way forward for establishing new opportunities in research and industrial sectors.

Keywords: penetration depth, NIR, XRF, imaging, stratigraphy, chemometrics

Acknowledgements: Financial support provided by the Italian Ministry of Universities and Research - MUR (Research Project PRIN 2022 n. 20223WBTH8, CUP: D53D23008950006) is gratefully acknowledged.

P14: La piattaforma Aquacontrol come strumento per il monitoraggio di processo e della qualità di prodotti ortofrutticoli

Tiziana M. P. Cattaneo¹, Giovanna Cortellino¹, Marta Fibiani¹, Maristella Vanoli¹, Marcello Vanzulli², Laura Marinoni^{1,*}

¹ CREA Centro di ricerca Ingegneria e Trasformazioni agroalimentari, Via G. Venezian 26, 20133 Milano, tiziana.cattaneo@crea.gov.it

² CHEMOVISIONS, Cornaredo, Milano, 20007 Italy, [*laura.marinoni@crea.gov.it](mailto:laura.marinoni@crea.gov.it)

L'evoluzione dei settori dell'informatica e dell'elettronica avvenuta negli ultimi anni ha portato ad una serie di soluzioni e strumenti, caratterizzati da un elevato contenuto tecnologico, che hanno influenzato e cambiato la società moderna.

La moderna tecnologia NIR offre analisi rapide ed economicamente vantaggiose che possono consentire il controllo di qualità sia in ambienti di laboratorio che di campo. L'ultimo decennio è stato caratterizzato anche da un grande miglioramento degli algoritmi matematici in grado di risolvere problemi legati alle "differenze apparenti" tra campioni e set di dati, che potrebbero aumentare i rischi di fraintendere il significato dei dati analizzati ed elaborati. L'acquafotomica si basa su questi presupposti: utilizza il modello spettrale dell'acqua come biomarcatore olistico in grado di fornire informazioni utili sulle proprietà del sistema studiato. Il valore aggiunto dell'acquafotomica è l'uso della spettroscopia nella regione del vicino infrarosso combinato con l'analisi spettrale multivariata dei modelli di assorbimento dell'acqua.

In un recente articolo (Cattaneo et al., 2024) una piattaforma digitale, denominata Aquacontrol, è stata messa a punto per il monitoraggio dei processi di essiccazione. È stata progettata principalmente come strumento utile per gli utenti finali (agricoltori, tecnici del settore, piccoli produttori, ecc.), non sempre in grado di elaborare dati complessi utilizzando tecniche statistiche multivariate. In questo lavoro la stessa piattaforma è stata utilizzata per verificarne l'idoneità all'elaborazione di dati NIR relativi allo studio di: shelf life di prodotti vegetali di IV gamma e uso di atmosfere modificate e grado di maturazione della frutta fresca. Questo approccio ci consente di ottenere una modalità semplificata per aiutare gli utenti finali nella raccolta di informazioni utili relative a: qualità, maturazione, trasformazione, lavorazione e conservazione dei prodotti vegetali freschi o trasformati.

Parole chiave: acquafotomica, monitoraggio di processo, shelf life, chemiometria

Ringraziamenti: Gli autori ringraziano per il finanziamento ricevuto dal MASAF, sub-project AgroFiliera, AgriDigit programme - DM 36503.7305.2018 of 20/12/2018).

P14: The Aquacontrol platform as a tool for monitoring processes and quality of horticultural products

The evolution of the information technology and electronics sectors that occurred in recent years has led to a series of solutions and tools, characterized by a high technological content, which have affected and changed modern society.

Modern NIR technology offers fast and cost-effective analyses that can afford quality control in both the laboratory and factory environments. Last decade was also characterized by a great improvement of mathematic algorithms able to solve problems related to “apparent differences” among samples and sets, that could increase the risks of misunderstanding the significance of analysed and processed data. Then, aquaphotomics relies on these assumptions: it uses the spectral model of water as a holistic biomarker able to provide helpful information on the properties of the studied system. The added value of aquaphotomics is the use of spectroscopy in the near-infrared region combined with multivariate spectral analysis of water absorption patterns.

In a recent paper (Cattaneo et al., 2024) a digital platform, named Aquacontrol, was primarily set up for monitoring drying processes. It was designed as useful tool for end users (farmers, sector technicians, small scale producers, etc.), not always able of processing complex data using multivariate statistical techniques. In this work, the same platform was used in verifying its suitability in processing NIR data related to the study of: the shelf life of ready-to-eat vegetable products and the use of modified atmospheres and the ripening stage of fresh fruit. This approach allows us to obtain a simplified way to help the end users for collecting useful information related to quality, ripeness, processing and storage of vegetable products.

Keywords: aquaphotomics, process monitoring, shelf life, chemometrics

Acknowledgements: the authors gratefully acknowledge receiving funding from MASAF, sub-project AgroFiliere, AgriDigit programme - DM 36503.7305.2018 of 20/12/2018).

Riferimenti:

Cattaneo, T.M. and Marinoni, L., 2024. Monitoring vegetable dehydration process by aquaphotomics from lab scale to farm. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 315, p.124299.

P15: Near-infrared hyperspectral imaging per mappare il contenuto dicollagene in ossa preistoriche per la datazione al radiocarbonio

Cristina Malegori¹, Giorgia Sciutto², Paolo Oliveri¹, Silvia Prati¹, Lucrezia Gatti², Emilio Catelli², Stefano Benazzi³, Silvia Cercatillo⁴, Dragana Paleček⁴, Rocco Mazzeo² & Sahra Talamo⁴

¹ Department of Pharmacy, University of Genova, Viale Cembrano 4, I-16148 Genova

² Department of Chemistry "G. Ciamician", University of Bologna, Ravenna Campus, Via Guaccimanni, 42, 48121 Ravenna, lucrezia.gatti2@unibo.it

³ Department of Cultural Heritage, University of Bologna, Via degli Ariani 1, 48121 Ravenna

⁴ Department of Chemistry G. Ciamician, Alma Mater Studiorum, University of Bologna, Via Selmi 2, 40126 Bologna

Molte delle ossa preistoriche più rare trovate dagli archeologi sono enormemente preziose e sono considerate parte del nostro patrimonio culturale e storico. Preservare l'integrità di rare ossa preistoriche determinandone con precisione l'età è cruciale per gli studi culturali e storici. La datazione radiocarbonica tradizionale, sebbene efficace, presenta limitazioni a causa della sua natura distruttiva (Talamo et al., 2021). Recentemente, sono stati applicati metodi di NIR-HSI per ottenere mappe spettrali che rivelano la distribuzione del collagene in ossa di grandi dimensioni (Lugli et al., 2021). Tuttavia, questo metodo offre solo una stima della distribuzione del collagene. Inoltre, il pretrattamento utilizzato in questo studio non era lo stesso di quello usato nei laboratori di radiocarbonio.

In questo studio, proponiamo un approccio non distruttivo che utilizza la spettroscopia nel vicino infrarosso (NIR) accoppiata con una telecamera a imaging iperspettrale (HSI) per quantificare la presenza di collagene in ossa antiche e localizzarne la distribuzione. Combinando l'approccio di acquisizione non invasivo con un modello di regressione multivariata Partial Least Squares (PLS), abbiamo ottenuto mappe chimiche della distribuzione del collagene. Questo modello quantifica il collagene in ogni pixel e fornisce quindi una mappatura chimica del contenuto di collagene, correlando la quantità relativa di collagene e gli assorbimenti NIR. L'approccio proposto consente una quantificazione e localizzazione precisa del collagene all'interno dei campioni ossei, facilitando la selezione delle regioni ottimali per successive analisi di datazione radiocarbonica.

I nostri risultati promettono significativi contributi allo studio dell'evoluzione umana, minimizzando la distruzione del materiale osseo, salvaguardando così il nostro patrimonio culturale e fornendo un contesto cronologico accurato per preziosi resti.

Parole chiave: imaging iperspettrale, ossa antiche, mapping del collagene, chemiometria

P15: Near-infrared hyperspectral imaging to map collagen content in prehistoric bones for radiocarbon dating

Many of the rarest prehistoric bones found by archaeologists are enormously precious and are considered to be part of our cultural and historical patrimony. Preserving the integrity of rare prehistoric bones while accurately determining their age is crucial for cultural and historical studies. Traditional radiocarbon dating, although effective, poses limitations due to its destructive nature (Talamo et al., 2021). Recently, NIR-HSI has been applied to obtain spectral maps that reveal the collagen distribution in large bones (Lugli et al., 2021). However, this method offers only an estimation of the distribution of collagen. Moreover, the pretreatment used in this study was not the same as the one used in radiocarbon laboratories.

In this study, we propose a non-destructive approach utilizing near-infrared spectroscopy (NIR) coupled with a camera with hyperspectral imaging (HSI) to quantify collagen presence in ancient bones and to localize its distribution. Combining the acquisition non-invasive approach with a multivariate partial least squares (PLS) regression model, we obtained chemical maps of the collagen distribution. This model quantifies the collagen at every pixel and thus provides a chemical mapping of collagen content, correlating the relative collagen amount and NIR absorptions. The proposed approach allows for precise collagen quantification and localization within bone samples, facilitating the selection of optimal regions for subsequent radiocarbon dating analysis.

Our findings promise significant contributions to the study of human evolution by minimizing bone material destruction, thereby safeguarding our cultural heritage and providing accurate chronological context to valuable artifacts.

Keywords: hyperspectral imaging, ancient remains, collagen mapping, chemometrics

Riferimenti:

- Lugli, F., Sciutto, G., Oliveri, P., Malegori, C., Prati, S., Gatti, L., Silvestrini, S., Romandini, M., Catelli, E., Casale, M. and Talamo, S., 2021. Near-infrared hyperspectral imaging (NIR-HSI) and normalized difference image (NDI) data processing: an advanced method to map collagen in archaeological bones. *Talanta*, 226, p.122126.
- Talamo, S., Fewlass, H., Maria, R. and Jaouen, K., 2021. "Here we go again": the inspection of collagen extraction protocols for ¹⁴C dating and palaeodietary analysis. *STAR: Science & Technology of Archaeological Research*, 7(1), pp.62-77.

P16: Identificazione di campioni di origano adulterato mediante imaging iperspettrale nel vicino infrarosso

Rosalba Calvini¹, Veronica Ferrari¹, Camilla Menozzi¹, Alessandro Ulrici¹, Marco Bragolusi², Roberto Piro², Alessandra Tata², Michele Suman^{3,4}, Giorgia Foca¹

¹ Dipartimento di Scienze della Vita, Università di Modena e Reggio Emilia, Pad. Besta, Via Amendola, 2, 42122, Reggio Emilia, rosalba.calvini@unimore.it

² Istituto Zooprofilattico Sperimentale delle Venezie, Laboratorio di Chimica Sperimentale, Viale Fiume 78, 36100, Vicenza

³ Analytical Food Science, Barilla G. e R. Fratelli S.p.A., Via Mantova, 166, 43122, Parma

⁴ Department for Sustainable Food Process, Università Cattolica del Sacro Cuore, Piacenza

L'origano è spesso soggetto ad adulterazione per l'aggiunta di parti essiccate di piante di diversa origine botanica (European Spice Association, 2018). In questo studio abbiamo valutato la capacità dell'imaging iperspettrale nel vicino infrarosso (NIR-HSI) nell'identificare adulterazioni in campioni di origano considerando i più comuni adulteranti quali foglie di olivo, sommacco, corbezzolo e mirto (Ferrari et al., 2024). Questa tecnica analitica, infatti, consente di ottenere sia le informazioni spaziali che spettrali dei campioni in modo rapido e non distruttivo. Le immagini iperspettrali di campioni di origano autentico, adulterato e degli adulteranti puri sono state acquisite nel range 980-1660 nm. I modelli di classificazione sono stati calcolati utilizzando due diversi algoritmi: Soft Independent Modelling of Class Analogies (SIMCA) e Soft Partial Least Squares Discriminant Analysis (Soft PLS-DA) (Calvini et al., 2018).

I risultati migliori sono stati ottenuti con Soft PLS-DA, metodo di classificazione ibrido che unisce i vantaggi del modellamento di classe e dell'analisi discriminante. Inoltre, a partire dalle immagini in predizione di Soft PLS-DA, è stato possibile stabilire un valore soglia pari al 10% di adulterazione per distinguere campioni autentici e adulterati.

Parole chiave: imaging iperspettrale, origano, classificazione, adulterazione

Ringraziamenti: Gli autori ringraziano il Dipartimento di Scienze della Vita, Università di Modena e Reggio Emilia per il finanziamento ricevuto tramite il programma "FAR_DIP2022".

P16: Detection of adulterations in dried oregano samples using NIR Hyperspectral Imaging

Economically motivated adulteration of dried oregano leaves with cheaper plant materials is a growing concern (European Spice Association, 2018).

In this study, we evaluated the ability of Near Infrared-Hyperspectral Imaging (NIR-HIS) in differentiating authentic oregano samples from those adulterated with its frequent adulterants like olive, sumac, strawberry tree, and myrtle leaves (Ferrari et al., 2024). Indeed, NIR-HSI is a promising tool to address this issue thanks to its ability of capturing both spatial and spectral information of a sample in a fast and non-destructive manner.

NIR hyperspectral images of authentic oregano, adulterated oregano and pure adulterants were acquired in the 980 - 1660 nm spectral range. Two classification algorithms were applied to distinguish authentic oregano and pure adulterants: Soft Independent Modelling of Class Analogies (SIMCA) and Soft Partial Least Squares Discriminant Analysis (Soft PLS-DA). Soft PLS-DA provided the best performances due to its ability of combining the advantages of class modelling and discriminant analysis (Calvini et al., 2018). Based on the prediction images obtained from Soft PLS-DA outcomes, it was possible to set a threshold value of 10% adulteration serving as a detection limit to distinguish authentic and adulterated oregano samples.

Keywords: hyperspectral imaging, oregano, classification, adulteration

Acknowledgements: The authors would like to thank the funding programme “FAR_DIP2022”, Department of Life Sciences - University of Modena and Reggio Emilia.

Riferimenti:

- European Spice Association, 2018. Adulteration Awareness Document. <https://www.esa-spices.org/download/esa-adulteration-awareness-document2>
- Calvini, R., Orlandi, G., Foca, G. and Ulrici, A., 2018. Development of a classification algorithm for efficient handling of multiple classes in sorting systems based on hyperspectral imaging. *Journal of Spectral Imaging*, 7, pp.1-15.
- Ferrari, V., Calvini, R., Menozzi, C., Ulrici, A., Bragolusi, M., Piro, R., Tata, A., Suman, M. and Foca, G., 2024. Addressing adulteration challenges of dried oregano leaves by NIR HyperSpectral Imaging. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 249, p.105133.

P17: Visualizzazione di danni causati da *Halyomorpha halys* su pere mediante imaging iperspettrale nel vicino infrarosso

Veronica Ferrari¹, Rosalba Calvini¹, Camilla Menozzi¹, Peter Offermans², Lara Maistrello¹, Giorgia Foca¹, Alessandro Ulrici¹

¹ Dipartimento di Scienze della Vita, Università di Modena e Reggio Emilia, Pad. Besta, Via Amendola, 2, 42122, Reggio Emilia, veronica.ferrari@unimore.it

² IMEC One Planet, Bronland, 10, Wageningen

Negli ultimi anni la produzione di pere in Italia è stata fortemente colpita da *Halyomorpha halys*, un insetto invasivo che ha causato ingenti danni economici (Bariselli et al., 2016). Le punture di *H. halys* che avvengono vicino alla raccolta causano danni interni non visibili ad occhio nudo. In questo lavoro abbiamo valutato le potenzialità dell'imaging iperspettrale nel vicino infrarosso (NIR-HSI) come tecnica utilizzabile in sistemi di cernita post-raccolta per visualizzare i danni sulle pere causati da *H. halys*. In due diverse annate sono state acquisite immagini iperspettrali nel vicino infrarosso (1156 - 1674 nm) di pere esposte a *H. halys* e pere di controllo. Per monitorare l'evoluzione dei danni nel tempo, le acquisizioni sono state effettuate il giorno della raccolta ed a cadenza regolare per le sei settimane successive. In totale sono state acquisite circa 2000 immagini. Per selezionare in maniera automatizzata le Regions of Interest (ROI) delle aree punte e ridurre la dimensionalità del dataset, le immagini sono state convertite in iperspettrogrammi, ovvero segnali monodimensionali che codificano le proprietà spaziali e spettrali delle immagini originali (Calvini et al., 2016). Il dataset degli iperspettrogrammi è stato analizzato con l'algoritmo *interval Partial Least Squares-Discriminant Analysis* (iPLS-DA), per identificare le *features* spaziali riconducibili alle punture. La ricostruzione di tali *features* nel dominio originale delle immagini ha permesso l'identificazione delle ROI corrispondenti alle aree punte. Grazie a questa procedura sarà possibile creare un dataset di spettri rappresentativi di aree punte ed aree sane, in modo tale da calcolare modelli di classificazione *pixel-level*.

Parole chiave: imaging iperspettrale, pere, classificazione, rilevazione di danni

Ringraziamenti: Gli autori ringraziano per il finanziamento ricevuto dal programma ERANET Cofund ICT-AGRI-FOOD, tramite il progetto HALY.ID (862671).

P17: NIR Hyperspectral Imaging for the visualization of damages on pears caused by *Halyomorpha halys*

In recent years, pear production in Italy has been affected by *Halyomorpha halys*, an invasive insect pest that caused severe economic losses (Bariselli et al., 2016). *H. halys* punctures occurring close to the harvest period determine internal damages not visible to the naked eye. In this study, we evaluated the potential of near-infrared hyperspectral imaging (NIR-HSI) as a post-harvest sorting technique able to visualise damages on pears caused by *H. halys*. NIR hyperspectral images (1156 - 1674 nm) of pears exposed to *H. halys* and control pears were acquired in two harvest years. To monitor the evolution of damages over time, the images were acquired at different acquisition sessions from harvesting to the following six weeks. On the whole, the final dataset was composed of about 2000 images. To automatically select the Regions of Interest (ROIs) of punctured areas and reduce the dimensionality of the dataset, the images were converted into hyperspectrograms, i.e. one-dimensional signals that encode the spatial and spectral properties of the original images (Calvini et al., 2016). The hyperspectrograms dataset was analysed with interval Partial Least Squares-Discriminant Analysis (iPLS-DA) algorithm, in order to identify the spatial features ascribable to the punctures. The reconstruction of these features back into the original image domain allowed the identification of the ROIs corresponding to punctured areas. Thanks to this procedure, it will be possible to obtain a dataset of representative spectra of both damaged and sound areas to be used for the calculation of pixel-level classification models.

Keywords: hyperspectral imaging, pears, classification, damage detection

Acknowledgements: the authors gratefully acknowledge receiving funding from ERA-NET Cofund ICT AGRI-FOOD funding programme through HALY.ID project (862671).

Riferimenti:

- Bariselli, M., Bugiani, R. and Maistrello, L., 2016. Distribution and damage caused by *Halyomorpha halys* in Italy. *Eppo Bulletin*, 46(2), pp.332-334.
- Calvini, R., Foca, G. and Ulrici, A., 2016. Data dimensionality reduction and data fusion for fast characterization of green coffee samples using hyperspectral sensors. *Analytical and bioanalytical chemistry*, 408, pp.7351-7366.

P18: Decomposizione Block Term come metodo promettente per l'analisi delle immagini iperspettrali

Alessandra Olarini^{1,2}, Marina Cocchi¹, Ludovic Duponchel², Cyril Ruckebusch²

¹ University of Modena and Reggio Emilia, Department of Chemical and Geological Sciences, Via G. Campi 103, 41125, Modena, marina.cocchi@unimore.it

² University of Lille, LASIRE, Cité Scientifique, 59650, Villeneuve d'Ascq

I metodi di decomposizione tensoriale sono un approccio ampiamente utilizzato nella comunità chemiometrica, anche se la loro applicazione nell'analisi delle immagini iperspettrali è meno comune.

Tuttavia, esistono applicazioni, soprattutto nella comunità “remote sensing”, del metodo Block Term Decomposition (BTD) (De Lathauwer, 2008), che si colloca a metà strada tra metodi più noti quali PARAFAC e Tucker3 (Kolda e Bader, 2009). Un caso particolare di BTD è la decomposizione $(L_r, L_r, 1)$, che impone rango = 1 in uno dei modi (modo spettrale) e consente ranghi uguali, diversi da uno, per gli altri due modi (modi spaziali). BTD ha attirato attenzione perché consente la risoluzione delle componenti spettrali (come PARAFAC), essendo al contempo più flessibile per descrivere strutture spaziali complesse relative a una singola componente spettrale. Inoltre, l'unicità della soluzione è parzialmente preservata (De Lathauwer, 2008).

Questo studio analizza la performance della decomposizione $(L_r, L_r, 1)$ su immagini iperspettrali relative a diversi set di dati in ambito chimico e remote sensing. In particolare, sono state esplorate due strategie per determinare il numero di componenti/fattori e la dimensionalità dei modi spaziali (L_r), tematica che è ancora oggetto di indagine.

I risultati hanno dimostrato un certo potenziale per l'analisi delle immagini iperspettrali, soprattutto nei casi complessi in cui la relazione tra i dati non è necessariamente bilineare e in cui un metodo bilineare di risoluzione spettrale, applicato dopo l'unfolding pixel-wise, non porterebbe a una descrizione corretta/completa del sistema complesso oggetto di studio.

Parole chiave: Imaging Iperspettrale, Decomposizione Tensoriale, Decomposizione Block Term, Decomposizione $(L_r, L_r, 1)$

P18: Block Term Decomposition as a promising method for hyperspectral image analysis

Tensor decomposition methods are a widely used approach in the chemometric community, although their application in the analysis of hyperspectral images is less common.

However, there are applications, especially in the remote sensing community, of Block Term Decomposition (BTD) (De Lathauwer, 2008), which lies between the better-known methods such as PARAFAC and Tucker3 (Kolda and Bader, 2009). A special case of BTD is the $(L_r, L_r, 1)$ decomposition, which imposes rank = 1 for one mode (spectral mode) and allows equal ranks, different from one, for the other two modes (spatial modes). BTD has attracted attention because it allows unmixing of the spectral components (as PARAFAC) while adapting to more complex spatial structures related to a single spectral signature. In addition, the uniqueness of the solution is partially preserved (De Lathauwer, 2008).

This study investigates the suitability of $(L_r, L_r, 1)$ decomposition on a number of chemical and remote sensing datasets. In particular, two strategies are explored to determine the number of components/factors and the dimensionality of the spatial modes (L_r), which is still a matter of investigation. The results have demonstrated some potential for the analysis of hyperspectral images, especially in complex cases where the data relationship is not necessarily bilinear and where a bilinear spectral unmixing method applied after pixel-wise unfolding would not lead to a correct/complete description of the complex system under study.

Keywords: Hyperspectral Imaging, Tensor Decomposition, Block Term Decomposition, $(L_r, L_r, 1)$ Decomposition

Riferimenti:

De Lathauwer, L., 2008. Decompositions of a higher-order tensor in block terms—Part II: Definitions and uniqueness. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 30(3), pp.1033-1066.

Kolda, T.G. and Bader, B.W., 2009. Tensor decompositions and applications. *SIAM review*, 51(3), pp.455-500.

P19: Imaging iperspettrale nel vicino infrarosso e chemiometria nella classificazione di diverse varietà di riso

Elena Cazzaniga¹, Nicola Cavallini¹, Francesco Savorani¹, Francesco Geobaldo¹, Adrian Gómez-Sanchez², Anna De Juan²

¹ Politecnico di Torino, Dipartimento di Scienza Applicata e Tecnologia, Corso Duca degli Abruzzi 24, 10129, Torino, Italy, elena.cazzaniga@polito.it

² Universitat de Barcelona, Dipartimento di Chimica Analitica, Carrer de Martí I Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

L'imaging iperspettrale (HSI) è una tecnica analitica non distruttiva altamente informativa, che fornisce sia informazioni spettrali che spaziali sul campione analizzato. I numerosi vantaggi di questa tecnica ne permettono l'applicazione in diversi campi (Aviara et al., 2022), uno dei quali è il settore agro-alimentare. HSI permette di analizzare un numero consistente di campioni, rendendo possibile l'ottenimento della loro impronta chimica. Inoltre, è possibile sfruttare le caratteristiche morfologiche estratte dalle immagini: diventa infatti possibile discriminare i campioni non solo in base al loro profilo chimico, ma anche grazie ai loro parametri strutturali.

In questo lavoro, l'HSI è stato usato per analizzare 47 diverse varietà di riso. Per ogni varietà è stata acquisita un'immagine con 15 chicchi di riso, e un'altra immagine con 100 chicchi. Le immagini sono state pre-processate per rimuovere l'effetto di scatter della luce incidente, e gli effetti ottici dovuti alla forma curva della lente. Il segnale è stato poi convertito da riflettanza ad assorbanza, e i dati provenienti dalle due immagini sono stati uniti ottenendo un file individuale con le informazioni di entrambe le immagini registrate.

Al fine di poter trattare l'enorme quantità e complessità dei dati ottenuti, questa tecnica viene generalmente accoppiata a strumenti di analisi multivariata e deep learning (Bao et al., 2019, Wang et al., 2015). In questo studio è stata applicata l'analisi multivariata attraverso tools chemiometrici per studiare i dati, in ambiente MATLAB: per prima cosa, è stata utilizzata la Principal Components Analysis (PCA) per esplorare l'informazione contenuta nei campioni, sia per le caratteristiche spettrali che per quelle morfologiche. Successivamente, sono stati applicati la Partial Least Square - Discriminant Analysis (PLS-DA) e modelli gerarchici di classificazione al fine di costruire modelli robusti che possano essere utilizzati nell'ottica della lotta alla frode alimentare. I risultati ottenuti hanno permesso di ricavare informazioni utili circa le differenze chimiche e strutturali tra le varietà di riso in esame, permettendone anche un raggruppamento in macro-categorie in accordo con le loro caratteristiche morfologiche e spettrali.

Parole chiave : imaging iperspettrale, riso, analisi multivariata, frodi alimentari

P19: Near-infrared hyperspectral imaging and chemometrics to classify different rice varieties

Hyperspectral imaging (HSI) is a non-destructive, highly informative analytical technique that provides both spectral and spatial information about the analysed samples. The advantages of this technique allow its application in many fields (Aviara et al., 2022), one of which is the agro-food field. In this context, the possibility not to compromise samples and avoid their manipulation or destruction during the analyses is of particular interest, because it prevents wastes and allows to re-use the food samples. As another advantage, HSI allows to analyse a large number of samples, making it possible to eventually obtain their chemical fingerprint. Moreover, an additional source of information comes from the morphological features extracted from the images: it is possible not only to discriminate samples based on their chemical profile, but also considering structural parameters.

In the present work, HSI was used to analyse 47 different rice varieties. For each variety, one image with 15 rice grains and one image with 100 grains were taken. For this purpose, a NIR-HSI camera (SPECIM FX17, Finland) connected with a motorized scanning bed (LabScanner Setup 40×20 cm) was used. The images were pre-processed to remove light scattering and optical effects due to the round shape of the camera's lenses. The data were then converted from reflectance to absorbance and merged to obtain an individual data file gathering the information from both collected images (15 and 100 grains).

In order to handle the complex and plentiful amount of information, this technique is usually combined with multivariate analysis and deep-learning tools (Bao et al., 2019, Wang et al., 2015). Multivariate data analysis was applied to inspect and model the data under MATLAB environment. Firstly, Principal Component Analysis (PCA) was used to gather a general idea of the information carried by the samples, both for spectral and morphological features. Then, different classification methods were applied to build robust and reliable models aimed at distinguishing among the varieties, with the perspective of counteracting food-fraud. To do that, Partial Least Squares-Discriminant Analysis (PLS-DA) and hierarchical classification models were exploited. The obtained results provided interesting insights into the chemical and structural differences occurring among the rice varieties under examination, which could also be clustered into macro-groups according to their similar morphological and spectral features.

Keywords: hyperspectral imaging, rice, multivariate data analysis, food fraud

Riferimenti:

- Bao, Y., Mi, C., Wu, N., Liu, F. and He, Y., 2019. Rapid classification of wheat grain varieties using hyperspectral imaging and chemometrics. *Applied Sciences*, 9(19), p.4119.
- Aviara, N.A., Liberty, J.T., Olatunbosun, O.S., Shoyombo, H.A. and Oyeniyi, S.K., 2022. Potential application of hyperspectral imaging in food grain quality inspection, evaluation and control during bulk storage. *Journal of Agriculture and Food Research*, 8, p.100288.
- Wang, L., Liu, D., Pu, H., Sun, D.W., Gao, W. and Xiong, Z., 2015. Use of hyperspectral imaging to discriminate the variety and quality of rice. *Food analytical methods*, 8, pp.515-523.

P20: Olii di oliva come alimento funzionale: aumento del contenuto di antiossidanti tramite nuove pratiche agronomiche

Consuelo Pizarro, José María González-Sáiz, Isabel Esteban, Taha Mehani

Universidad de La Rioja (Spagna), consuelo.pizarro@unirioja.es

“Siamo ciò che mangiamo” questa frase sottolinea l'enorme impatto che l'alimentazione ha sulla salute. Diversi studi epidemiologici hanno evidenziato il ruolo chiave degli alimenti di origine vegetale nella prevenzione di malattie neurodegenerative, metaboliche e oncologiche, in particolare la presenza di antiossidanti, principalmente polifenoli (Lozano-Castellón et al., 2024). Tra tutti i polifenoli conosciuti, l'idrossitirosolo si distingue, un composto che si può trovare esclusivamente nella natura in un luogo: l'olivo, concentrato principalmente nelle foglie e anche nell'oliva.

Nel contesto della legislazione alimentare, l'idrossitirosolo e i suoi derivati sono gli unici polifenoli che hanno ottenuto un'indicazione di salute nell'elenco di rivendicazioni approvato dal Regolamento CE 1924/2006, con l'approvazione del pannello scientifico dell'EFSA (European Food Safety Authority). Pertanto, attualmente è permesso includere un'indicazione di salute sull'etichetta degli oli d'oliva vergine.

È stato condotto uno studio per aumentare il contenuto di biofenoli e i loro derivati attraverso nuove pratiche agronomiche utilizzando la metodologia del design sperimentale di Gareth A. Lewis et al., 1998. Il design selezionato per questo problema di cinque fattori (pendenza, irrigazione, orientamento, trattamento, varietà), con diversi livelli, è stato un design di screening asimmetrico di base $5^6//25$. Si tratta di un design composto da 25 esperimenti. Date le particolari caratteristiche delle fattorie coinvolte, riguardo alla possibilità di irrigazione e alle varietà disponibili, è stata necessaria una riduzione dei 25 esperimenti, che è stata infine validata attraverso un algoritmo di scambio per studiare l'influenza dei fattori agronomici per la massimizzazione dei biofenoli e dei loro derivati. Il contenuto totale di biofenoli e la concentrazione di idrossitirosolo sono stati valutati tramite NIRS.

Parole chiave: olio d'oliva, design sperimentale, fattori agronomici, biofenoli e idrossitirosolo.

Ringraziamenti: Gli autori ringraziano per il finanziamento ricevuto dal Marie Skłodowska-Curie COFUND dell'Unione Europea. (Grant agreement 801586).

P20: Olive oil as a functional food: increase in antioxidant content through new agronomic practices

"We are what we eat" - this phrase encapsulates the significant impact that diet has on health. Various epidemiological studies have highlighted the role of plant-based foods in preventing neurodegenerative, metabolic, and cancer-related diseases, particularly due to the presence of antioxidants, mainly polyphenols (Lozano-Castellón et al., 2024). Among all known polyphenols, hydroxytyrosol stands out. This compound can only be found in nature in one place: the olive tree, mainly in its leaves and also in the olive fruit.

In the context of food legislation, hydroxytyrosol and its derivatives are the only polyphenols that have obtained a health claim within the list of claims approved by Regulation EC 1924/2006, with the endorsement of the scientific panel of the EFSA (European Food Safety Authority). Consequently, it is currently permitted to include a health claim on the label of virgin olive oils.

A study has been conducted to increase the content of biophenols and their derivatives through new agronomic practices using the experimental design methodology of Gareth A. Lewis et al., 1998. The design chosen for this problem with five factors (slope, irrigation, orientation, treatment, variety), at different levels, has been an asymmetric screening design based on 56//25. This design consists of 25 experiments. Given the specific characteristics of the involved farms, regarding irrigation possibilities and available varieties, a reduction of the 25 experiments had to be made, resulting in a design with 15 experiments. This reduction was validated through an algorithm exchange study to assess the influence of agronomic factors for maximizing biophenol and its derivatives. The total biophenol content and hydroxytyrosol concentration were evaluated using NIRS.

Keywords: olive oil, experimental design, agronomic factors, biophenols, and hydroxytyrosol

Acknowledgements: the authors gratefully acknowledge receiving funding from Marie Skłodowska-Curie COFUND of the European Union. (Grant agreement 801586)

Riferimenti:

- Lozano-Castellón, J., Olmo-Cunillera, A., Casadei, E., Valli, E., Domínguez-López, I., Miliarakis, E., Pérez, M., Ninot, A., Romero-Aroca, A., Bendini, A. and Lamuela-Raventós, R.M., 2024. A targeted foodomic approach to assess differences in extra virgin olive oils: Effects of storage, agronomic and technological factors. *Food Chemistry*, 435, p.137539.
- Gareth A. Lewis , Didier Mathieu, et ál. 1998. *Pharmaceutical Experimental Design (Drugs and the Pharmaceutical Sciences Book 92)*

P21: Sviluppo di un prototipo per il monitoraggio online della fermentazione del mosto

Alessia Pampuri¹, Alessio Tugnolo¹, Valentina Giovenzana¹, Sara Vignati¹, Riccardo Guidetti¹, Daniela Fracassetti² e Roberto Beghi¹

¹ Dipartimento di Scienze Agrarie e Ambientali - Produzione, Territorio, Agroenergia (DiSAA). Università degli Studi di Milano, Via Celoria 2, 20133, Milano, Italia, alessio.tugnolo@unimi.it

² Dipartimento di Scienze per gli Alimenti, la Nutrizione e l'Ambiente (DeFENS). Università degli Studi di Milano, Via Celoria 2, 20133, Milano, Italia

La fermentazione alcolica è una fase importante del processo di vinificazione. Oltre alla produzione di etanolo, porta alla formazione di numerosi metaboliti secondari che hanno un impatto significativo sulle caratteristiche del vino. Una gestione accurata della fermentazione alcolica assicura che essa avvenga in un tempo sufficientemente lungo, permettendo il rilascio degli aromi varietali e la formazione degli aromi fermentativi. Il blocco della fermentazione deve essere prevenuto poiché può impoverire il vino e portare alla comparsa di aromi indesiderati. In generale, il monitoraggio in linea di un processo, ottenibile grazie all'uso di sensori, consente un intervento rapido, evitando così l'insorgere di difetti.

Pertanto, è stato messo a punto un sistema per monitorare il processo di fermentazione utilizzando sensori ottici prossimali (600-1050 nm) e parti realizzate tramite stampa 3D. Il prototipo è stato testato per il monitoraggio della fermentazione a (i) scala di laboratorio (microvinificazioni) e (ii) scala industriale. Per quest'ultima, sono stati considerati 3 tipi di mosto (bianco, rosso e rosato) ottenuti da tre diverse partite di uva per un totale di 9 processi di fermentazione monitorati. Sono stati prelevati campioni giornalieri per la determinazione della concentrazione di zuccheri, misurata mediante analisi enzimatica, e per l'analisi ottica. I risultati dell'analisi enzimatica sono serviti come parametri di riferimento per lo sviluppo di modelli predittivi utilizzando il metodo PLS.

I modelli sviluppati su scala di laboratorio (validati internamente (CV)) hanno dimostrato la capacità del dispositivo di catturare, direttamente e/o indirettamente, le informazioni chimiche relative alla concentrazione di zuccheri dei campioni di mosto analizzati. I primi risultati riguardanti il monitoraggio della fermentazione su scala industriale (validati con set di test) indicano l'esistenza di una buona correlazione tra la concentrazione di zuccheri determinata mediante analisi ottica e analisi enzimatica.

Parole chiave: mosto, monitoraggio di processo, sensoristica miniaturizzata, rilevamento prossimale, additive manufacturing

P21: Development of a cost-effective prototype to monitor the must fermentation process

The alcoholic fermentation is an important phase of the winemaking process. Besides the production of ethanol, it leads to the formation of several secondary metabolites having a significant impact on the characteristics of the wine. A careful management of alcoholic fermentation ensures that it takes place over a sufficiently long time allowing the release of varietal aromas and the formation of fermentative aromas. Stuck fermentation should be prevented as it can impoverish the wine as well as it can lead to the appearance of undesired aromas. In general, in-line monitoring of a process, which can be achieved thanks to the use of sensors, allows for rapid intervention, thus avoiding the onset of defects.

The objective of the research was the development of a low-cost prototype to monitor the fermentation process using optical proximal sensors.

The system is equipped with optical sensors (600-1050 nm) and parts made via 3D printing. The prototype was tested for monitoring fermentation at (i) laboratory (microvinifications) and (ii) industrial scales. For the latter, 3 types of must were considered (white, red and rosé) obtained from three different batches of grapes for a total of 9 fermentation processes monitored. Samples were taken daily for the determination of sugar concentration, measured by enzymatic analysis, and for optical analysis. The enzymatic analysis results served as reference parameters for developing predictive models using the PLS method.

The models developed on a laboratory scale (cross-validated) have demonstrated the ability of the device to capture, directly and/or indirectly, the chemical information relating to the sugar concentration of the analyzed must samples. The first results regarding the monitoring of fermentation on an industrial scale (validated with test set) indicate the existence of a good correlation between the concentration of sugars determined by optical and enzymatic analysis.

Keywords: must, process monitoring, miniaturized sensors, proximal sensing, additive manufacturing

P22: Ottimizzazione del Riciclo Tessile con Spettroscopia NIR: Strategie e Criticità per una Moda Sostenibile

Francesca Stella, Nicola Cavallini, Alessandra Savina, Fabio A. Deorsola

Dipartimento di Scienza e Tecnologia Applicata (DISAT), Politecnico di Torino, Italy,
francesca.stella@polito.it

Negli ultimi anni, si è osservata una crescente discrepanza tra la tendenza al possesso di abiti sempre nuovi e le politiche europee incentrate sull'estensione della vita utile dei prodotti e sul loro riutilizzo. Il settore della moda, responsabile del 10% delle emissioni globali di CO₂ e secondo per inquinamento del suolo (European Parliament, 2024), richiede urgentemente politiche volte a mitigarne l'impatto ambientale, già in fase di discussione nelle normative europee e internazionali.

Una comprensione dettagliata della filiera tessile è essenziale per affrontare questa problematica. Attualmente, solo l'1% degli scarti tessili viene riciclato, mentre l'80% dei capi viene destinato all'incenerimento o alle discariche (Gupta et al., 2022). La conoscenza della composizione dei tessuti è cruciale per l'applicazione di tecniche di riciclo e valorizzazione adeguate. L'industria del fast fashion ha visto negli ultimi 30 anni un aumento dell'impiego di fibre di varia natura, spesso combinate per conferire agli abiti un'ampia gamma di caratteristiche.

In questo contesto, la spettroscopia NIR si presenta come una soluzione promettente per identificare la composizione dei materiali e applicare strategie di smistamento degli scarti. In base alla natura delle fibre, è possibile definire spettri caratteristici che agiscono come impronte digitali, descrivendo la composizione dei tessuti scartati, nonostante alcune problematiche. Questo articolo esamina lo stato attuale delle tecniche di smistamento, mettendo in luce le criticità e proponendo potenziali soluzioni per ottimizzare questa fase cruciale nel processo di riciclo tessile.

Parole chiave: design sistemico, smistamento dei materiali tessili, fast fashion

Ringraziamenti: This study was carried out within the MICS (Made in Italy - Circular and Sustainable) Extended Partnership and received funding from Next-Generation EU (Italian PNRR - M4 C2, Invest 1.3 - D.D. 1551.11-10-2022, PE00000004). CUP MICS C93C220052800.

P22: Textile Recycling Optimization with NIR Spectroscopy: Strategies and Challenges for Sustainable Fashion

In recent years, a growing disparity has been observed between the trend of acquiring constantly new garments and European policies focused on extending the lifespan of products and promoting their reuse. The fashion sector, responsible for 10% of global CO₂ emissions and second in soil pollution (European Parliament, 2024), urgently requires policies aimed at mitigating its environmental impact, already under discussion in European and international regulations.

A comprehensive understanding of the textile supply chain is essential to address this issue. Currently, only 1% of textile waste is recycled, while 80% of garments end up being incinerated or landfilled (Gupta et al., 2022). Knowledge of fabric composition is crucial for implementing appropriate recycling and valorization techniques. Over the past 30 years, the fast fashion industry has witnessed an increase in the use of various fibres, often combined to impart a wide range of characteristics to garments.

In this context, NIR spectroscopy emerges as a promising solution for identifying material compositions and implementing waste-sorting strategies. Depending on the nature of the fibres, characteristic spectra can be defined, acting as digital fingerprints, describing the composition of discarded textiles, despite some challenges. This article examines the current state of sorting techniques, highlighting the challenges and proposing potential solutions to optimize this critical phase in the textile recycling process.

Keywords: systemic design, textile material sorting, fast fashion

Acknowledgements: This study was carried out within the MICS (Made in Italy - Circular and Sustainable) Extended Partnership and received funding from Next-Generation EU (Italian PNRR - M4 C2, Invest 1.3 - D.D. 1551.11-10-2022, PE00000004). CUP MICS C93C220052800.

Riferimenti:

- European Parliament, Communication, D.G. for, 2024. The impact of textile production and waste on the environment (infographics) | News | European Parliament. <https://doi.org/20201208STO93327>
- Gupta, R., Kushwaha, A., Dave, D. and Mahanta, N.R., 2022. Waste management in fashion and textile industry: Recent advances and trends, life-cycle assessment, and circular economy. Emerging trends to approaching zero waste, pp.215-242.

P23: Il Potenziale di Applicazione Dell'imaging Iperspettrale Visibile-Vicino Infrarosso (Vis-NIR) per La Classificazione Dei Tipici Difetti nelle Bacche di Goji (*Lycium Barbarum L.*)

Danial Fatchurrahman¹, Federico Marini², Mojtaba Nosraty³, Andrea Peruzzi⁴, Maria Luisa Amodio¹

¹ Dipartimento di Scienze Agrarie, Alimenti, Risorse Naturali e Ingegneria (DAFNE), Università di Foggia, Via Napoli 25, 71122 Foggia, Italy, danial.fatchurrahman@unifg.it

² Department of Chemistry, Sapienza University of Rome, P. le Aldo Moro 5, 00185 Rome, Italy

³ Biosystems Engineering Department, Shiraz University, Shiraz, Iran

⁴ Dipartimento di Scienze Agrarie, Alimentari e Agro-ambientali, Università di Pisa, Via del Borghetto 80, 56124 Pisa, Italy

Le bacche di Goji sono riconosciute per le loro notevoli proprietà medicinali e antiossidanti contro i radicali liberi. Tuttavia, la loro deperibilità e suscettibilità a lesioni meccaniche e disturbi fisiologici limita di molto la loro diffusione come prodotto fresco. Scopo di questo lavoro è stato utilizzare l'imaging iperspettrale per l'identificazione di frutti con difetti al fine di facilitare le operazioni di selezione e cernita. È stato utilizzato uno scanner di imaging iperspettrale (HIS) per linee (Versione 1.4, DV srl, Padova, Italia) con detector Vis-NIR (400-1000 nm) con una risoluzione spaziale di 27.9 pixel/mm² e una risoluzione spettrale di 5 nm. I frutti sono stati suddivisi in 4 classi da un panel di esperti, 3 classi di difetti, in base alla severità e una classe per i frutti sani. È stato sviluppato un modello di classificazione supervisionato impiegando PLS-DA con l'integrazione di un algoritmo di Selezione della Covarianza (CovSel) per la selezione delle variabili e la validazione attraverso un approccio rDCV. Prima della costruzione e validazione del modello, gli spettri sono stati sottoposti a pre-trattamenti, inclusi MSC, la derivata seconda (Savitzky-Golay, finestre da 15 punti, polinomio di terzo ordine) e infine Mean centering. Il modello di classificazione ha dimostrato prestazioni superiori quando sono state usate solo 2 classi, sani e difettosi, raggiungendo un'accuratezza del 94,9 mentre ha dato performance inferiori, quando applicato alle 4 classi (accuratezza del 74,5%). Considerato che lo scopo di una selezionatrice in linea è quello di scartare il prodotto con difetti, e non di classificarli, i risultati indicano che un metodo basato sull'iperspettrale vis-NIR può essere implementato per la selezione online delle bacche di goji.

Parole chiave: PLS-DA, analisi multivariata, bacche di goji difettose, imaging iperspettrale, non distruttivo.

P23: The Potential Application of Visible-Near Infrared (Vis-NIR) Hyperspectral Imaging for Classifying Typical Defective Goji Berry (*Lycium barbarum* L.)

Goji berry is acknowledged for its notable medicinal attributes and elevated free radical scavenger properties. Nevertheless, their susceptibility to mechanical injuries and biological disorders reduces the commercial diffusion of the fruit. A hyperspectral imaging system (HIS) line scanner (Version 1.4, DV srl, Padova, Italy) was employed to identify common defects in the Vis-NIR range (400-1000 nm) possessing a spatial resolution of 27.9 pixels/mm² and 5 nm of spectral resolution. The sensorial evaluation of visual appearance was used to obtain the reference measurement of defects, with a total of 4 classes, 3 for defective fruit and one for sounds. A supervised classification model employing PLS-DA was developed with the integration of a Covariance Selection algorithm (CovSel) for variable selection and validation through an rDCV approach encompassed 10 cancellation sets of groups in the outer loop, 8 cancellation sets of groups in the inner loop, and as many as 50 double cross-validations (DCV) runs. Before the construction and validation of the model, the spectra underwent pre-treatment, including Multiplicative Scatter Correction (MSC), second derivative (Savitzky-Golay, 15 points windows, 3rd order polynomial), and finally mean centering. The classification model demonstrated superior performance when only 2 classes (sound and defective) were used, achieving an accuracy of 94.9%. However, when extended to a more complex task of classifying fruit into four categories, the model exhibited reliable results but with lower accuracy. These results indicate that a method based on hyperspectral visible-NIR can be implemented for the online sorting of defective goji berries.

Keywords: PLS-DA, multivariate-analysis, defective goji, hyperspectral imaging, non-destructive

P24: Monitoraggio delle variazioni chimiche dei chicchi di caffè durante la tostatura utilizzando la spettroscopia NIR in tempo reale e la chemiometria

Silvia Grassi¹, Alessandro Giraudo², Nicola Cavallini², Francesco Geobaldo², Ernestina Casiraghi¹, Francesco Savorani²

¹ Università di Milano, Dipartimento di Scienze per gli Alimenti, la Nutrizione e l'Ambiente, Via G. Celoria 2, 20133, Milano, Italia

² Politecnico di Torino, Dipartimento di Scienza Applicata e Tecnologia, Corso Duca degli Abruzzi 24, 10129, Torino, Italia, nicola.cavallini@polito.it

Durante la tostatura del caffè, le trasformazioni dei chicchi comportano numerosi fenomeni chimici e fisici, il cui tracciamento richiede metodi di monitoraggio rapidi e riproducibili. In questo studio (Grassi et al., 2023) abbiamo impiegato un approccio di monitoraggio analitico di processo (PAT) che combina la spettroscopia a trasformata di Fourier nel vicino infrarosso (FT-NIR) applicata in linea e accoppiata a metodi chemiometrici per fornire approfondimenti in tempo reale sui cambiamenti chimico-fisici durante la tostatura del caffè. Una sonda NIR è stata utilizzata per raccogliere spettri in linea da un tostino da laboratorio durante 24 esperimenti di tostatura, coinvolgendo diverse specie di caffè (Arabica e Robusta), quattro impostazioni di temperatura e diverse durate di tostatura. La modellazione con multivariate curve resolution - alternate least squares (MCR-ALS, (de Juan et al., 2014)) è stata utilizzata per tracciare questi cambiamenti, offrendo informazioni dettagliate sulla velocità massima, accelerazione e decelerazione del processo di tostatura.

Il metodo ha evidenziato l'impatto delle temperature di tostatura e delle varietà di caffè sulle trasformazioni chimico-fisiche, fornendo una comprensione completa della cinetica del processo. Questo studio dimostra che la spettroscopia FT-NIR, combinata con tecniche chemiometriche avanzate, può monitorare efficacemente il processo di tostatura in tempo reale, garantendo la riproducibilità e la coerenza della qualità del prodotto finale. I risultati stabiliscono un solido quadro per l'implementazione di un monitoraggio rapido e non invasivo in tempo reale del processo di tostatura su scala industriale, con l'obiettivo di garantire una qualità del caffè costante attraverso un controllo preciso dei parametri di tostatura. Questo approccio non solo migliora l'efficienza e l'accuratezza del processo di tostatura, ma apre anche la strada a future applicazioni della tecnologia NIR in vari settori della trasformazione alimentare.

Parole chiave: caffè, tostatura, monitoraggio di processo, MCR, chemiometria

P24: Monitoring Chemical Changes of Coffee Beans During Roasting Using Real-time NIR Spectroscopy and Chemometrics

Variations in coffee beans during roasting involve numerous chemical and physical phenomena, necessitating rapid and reproducible monitoring methods. This study (Grassi et al., 2023) employs a process analytical technology (PAT) approach combining in-line Fourier transform near-infrared (FT-NIR) spectroscopy with chemometric modeling to provide real-time insights into the chemical-physical changes during coffee roasting. A NIR probe was used to collect in-line spectra from a laboratory coffee roaster over 24 roasting experiments, involving different coffee species (Arabica and Robusta), four temperature settings, and different roasting durations. Multivariate curve resolution-alternate least squares (MCR-ALS, (de Juan et al., 2014)) modeling was used to track these changes, offering detailed information on the maximum rate, acceleration, and deceleration of the roasting process.

The method highlighted the impact of roasting temperatures and coffee varieties on the chemical-physical transformations, providing a comprehensive understanding of the process kinetics. This study demonstrates that FT-NIR spectroscopy, combined with advanced chemometric techniques, can effectively monitor the roasting process in real time, ensuring the reproducibility and quality consistency of the final product. The findings establish a robust framework for implementing rapid, non-invasive real-time monitoring of the roasting process on an industrial scale, aiming to ensure consistent coffee quality through precise control of roasting parameters. This approach not only enhances the efficiency and accuracy of the roasting process but also paves the way for future applications of NIR technology in various food processing industries.

Keywords: coffee, roasting, process monitoring, MCR, chemometrics

Riferimenti:

- De Juan, A., Jaumot, J. and Tauler, R., 2014. Multivariate Curve Resolution (MCR). Solving the mixture analysis problem. *Analytical Methods*, 6(14), pp.4964-4976.
- Grassi, S., Girardo, A., Novara, C., Cavallini, N., Geobaldo, F., Casiraghi, E. and Savorani, F., 2023. Monitoring chemical changes of coffee beans during roasting using real-time NIR spectroscopy and chemometrics. *Food Analytical Methods*, 16(5), pp.947-960.

P25: Spettroscopia NIR applicata nel campo degli Additivi Plastici (HALS) e dei Poliuretani

Emanuele Pizzano¹, Sonja Hardy², Monique Müller³, Daniele Moreschi⁴, Marcello Ricci⁴

¹ ALMA MATER STUDIORUM - Università di Bologna, Dipartimento di Chimica G. Ciamician, Via Francesco Selmi, 2, 40126 Bologna BO, Italia, emanuele.pizzano2@unibo.it

² BASF Personal Care and Nutrition GmbH, Henkelstraße 67, 40589, Düsseldorf, Germania

³ BASF Polyurethanes GmbH, Elastogranstraße 60, 49448 Lemförde, Germania

⁴ BASF Italia S.p.A., Via Pila 6/3, 40037 Pontecchio Marconi BO, Italia

La tecnica spettroscopica NIR è una ampiamente utilizzata in diversi settori industriali come quello alimentare (Silvia Grassi, Cristina Alamprese, 2018), farmaceutico. Nel nostro caso, abbiamo applicato la tecnica nel campo della produzione delle ammine stericamente ingombrate (HALS) utilizzando la regressione PLS per la quantificazione di analiti di interesse. Questo approccio ha portato a diversi benefici, tra i quali la rapidità di acquisizione dei dati spettrali, riduzione dei tempi di analisi rispetto ad altre tecniche primarie, riduzione dei materiali e solventi per condurre l'analisi quantitativa. I modelli sviluppati in attuale utilizzo sono 11 e raggiungono elevati valori di R^2 , spesso superiori al 99,0 %. Abbiamo anche utilizzato l'indice RPD per monitorare la qualità dei modelli. In molti casi per ottenere performance analitiche sufficientemente elevate per le nostre esigenze, i valori di RPD devono essere oltre 10. Inoltre, la spettroscopia NIR è risultata estremamente utile nella determinazione di alcuni analiti-non facilmente quantificabili tramite le tecniche cromatografiche o gran parte di quelle spettroscopiche. Data l'elevata compatibilità della tecnica NIR per i processi online, abbiamo sviluppato anche dei modelli dedicati per l'applicazione nel campo dei Poliuretani (PU). Nello specifico, abbiamo sviluppato un modello che è capace di dare quantificazioni di contenuto di acqua in uno specifico componente di PU. Questa è stata una sfida impegnativa data l'elevata variabilità della matrice e l'elevata esattezza richiesta dal modello. Ne consegue una strategia diversa da quella solitamente applicata che risulta essere il nesting di due diversi modelli NIR: uno generico con R^2 di 99,8 % ed RPD di 17,2, ed uno specifico per basse concentrazioni di acqua con R^2 di 99,7 % ed RPD di 18,5.

Keywords: HALS, poliuretani, monitoraggio di processo, metodi analitici, chemiometria

Ringraziamenti: Gli autori ringraziano la Prof.ssa Assimo Maris, la Dr.ssa Marzia Mazzacurati, l'Ing. Rene Wiegmann, per la supervisione dei progetti. Infine, l'autore corrispondente ringrazia BASF Italia S.p.A. per aver finanziato la borsa di dottorato in Chimica e ricerca nel campo della spettroscopia NIR.

P25: Near-infrared spectroscopy applied in the field of Plastic Additives (HALS) and Polyurethanes

NIR spectroscopic technique is widely used in various industrial sectors such as food, pharmaceutical. In our case, we have applied the technique in the field of hindered amine light stabilizers (HALS) production, using PLS regression to quantify analytes of interest. This approach has led to several benefits, including rapid acquisition of spectral data, reduced analysis time compared to other primary techniques, and reduced materials and solvents for quantitative analysis. The currently used models developed are 11 and achieve high R² values, often exceeding 99.0%. We have also used the RPD index to monitor the quality of the models. In many cases, to achieve sufficiently high analytical performance for our needs, RPD values must be above 10. Additionally, NIR spectroscopy has proven to be extremely useful in determining certain analytes that are not easily quantifiable through chromatographic or most spectroscopic techniques. Given the high compatibility of NIR technique for online processes, we have also developed dedicated models for application in the field of Polyurethanes (PU). Specifically, we have developed a model that can quantify water content in a specific PU component. This has been a challenging task given the high variability of the matrix and the high accuracy required by the model. As a result, a different strategy was applied, which involved nesting two different NIR models: one general model with an R² of 99.8% and RPD of 17.2, and one specific for low concentrations of water with an R² of 99.7% and RPD of 18.5.

Keywords: Chemometrics and Artificial Intelligence, Industry, Industry 4.0, PAT/process monitoring

Acknowledgements: The authors would like to thank Prof. Assimo Maris for the theoretical support, Dr. Marzia Mazzacurati, Ing. Rene Wiegmann for project supervision. Finally, the corresponding author thanks are extended to BASF Italia S.p.A. for funding the doctoral scholarship in Chemistry and research in the field of NIR spectroscopy.

P26: Strategie per il modellamento non-lineare dei dati spettroscopici

Federico Marini¹, Alessandra Biancolillo²

¹ Dipartimento di Chimica, Università di Roma “La Sapienza”, P.le Aldo Moro 5, 00185 Roma, federico.marini@uniroma1.it

² Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche, Università dell’Aquila, via Vetoio, 67100 Coppito (AQ)

L’evoluzione della moderna strumentazione ad alto rendimento, che permette la caratterizzazione relativamente rapida dei campioni (spesso mediante approcci multiplatforma e/o multidimensionali), si traduce in dati che, se non sempre “grandi”, hanno comunque un elevato grado di granularità, con diversi gradi di somiglianza e una generale disomogeneità dovuta a molte fonti di variazione, diverse da quelle di interesse. In questa comunicazione verranno discussi e confrontati possibili approcci per gestire le non linearità nei dati, soprattutto ma non esclusivamente nel contesto della modellazione predittiva. Insieme agli approcci basati sul kernel (Postma et al., 2011), particolare attenzione sarà dedicata alle possibilità offerte dalla modellazione locale. In effetti, gli approcci locali, che costruiscono modelli opportunistici basati solo su un sottoinsieme di casi più simili al/ai campione/i da prevedere, rappresentano uno strumento valido per ottenere un’elevata precisione e per tenere conto della stratificazione del set di dati. Recentemente, abbiamo proposto diverse modifiche al paradigma di regressione ponderata localmente (locally weighted regression), che hanno esteso il concetto di modellazione locale anche a set di dati multi-way o multi-block e che hanno consentito di intraprendere il trasferimento della calibrazione all’interno del paradigma della regressione ponderata localmente. Tutti questi nuovi algoritmi saranno presentati nella comunicazione, con particolare attenzione ad aspetti quali come effettuare una corretta validazione, possibili strumenti di interpretazione e come gestire possibili prestazioni subottimali in presenza di distribuzioni altamente irregolari. Verranno utilizzati esempi reali e simulati per illustrare le caratteristiche degli algoritmi proposti.

Parole chiave: modellazione locale, modellazione non lineare, regressione pesata localmente, chemiometria

P26: Strategies for non-linear modeling of spectroscopic data

The growth of modern high-throughput instrumentation, which makes available the relatively rapid characterization of samples (often by multiplatform and/or multidimensional approaches), results in data that, if not always "big", anyway have a high extent of granularity, with different degrees of similarity and a general inhomogeneity due to many sources of variation, other than those of interest. In this communication, possible approaches to deal with non-linearities in the data, especially but not exclusively in the context of predictive modeling, will be discussed and compared. Together with kernel-based approaches (Postma et al., 2011), particular attention will be devoted to the possibilities offered by local modeling. Indeed, local approaches, which build opportunistic models based only of a subset of instances being most similar to the sample(s) to be predicted, represent a valid tool to achieve high accuracy and to take into account the stratification of the data set. Recently, we proposed several modifications of the locally weighted regression paradigm, which extended the local modeling concept even to multi-way or multi-block data sets and which allowed to undertake calibration transfer within the locally weighted regression paradigm. All these new algorithms will be presented in the communication, with particular focus on aspects like how to undertake a proper validation, possible interpretation tools and how to deal with possible suboptimal performances in the presence of highly irregular distributions. Real and simulated examples will be used to illustrate the characteristics of the proposed algorithms.

Keywords: local modeling, non-linear modelling, locally weighted regression, chemometrics

Riferimenti:

- Centner, V. and Massart, D.L., 1998. Optimization in locally weighted regression. *Analytical Chemistry*, 70(19), pp.4206-4211.
- Postma, G.J., Krooshof, P.W.T. and Buydens, L.M.C., 2011. Opening the kernel of kernel partial least squares and support vector machines. *Analytica chimica acta*, 705(1-2), pp.123-134.

Simposio Nazionale NIR Italia 2024

Torino, 26-28 giugno



Where the invisible matters