

Metodologie NIR per indicatori di qualità, tracciabilità e valorizzazione del prodotto

Francesco Maria Tangorra

Dipartimento di Medicina Veterinaria e Scienze Animali
Università degli Studi di Milano



Progetto SIPARI – Intervento SRH05 – PSN PAC 2023-2027

Finanziato dal Fondo Europeo Agricolo per lo Sviluppo Rurale (FEASR)



Finanziato
dall'Unione europea



PSR

LOMBARDIA
L'INNOVAZIONE
METTE RADICI



Regione
Lombardia

Struttura della presentazione

1

- Principi spettroscopia NIR
- Modalità di misura
- Strumentazione disponibile

2

- Alcune applicazioni

3

- Limiti e prospettive



Contesto applicativo

- Analisi rapide
- Metodo non distruttivo
- Controlli lungo la filiera
- Richiesta di autenticità
- Supporto alla digitalizzazione

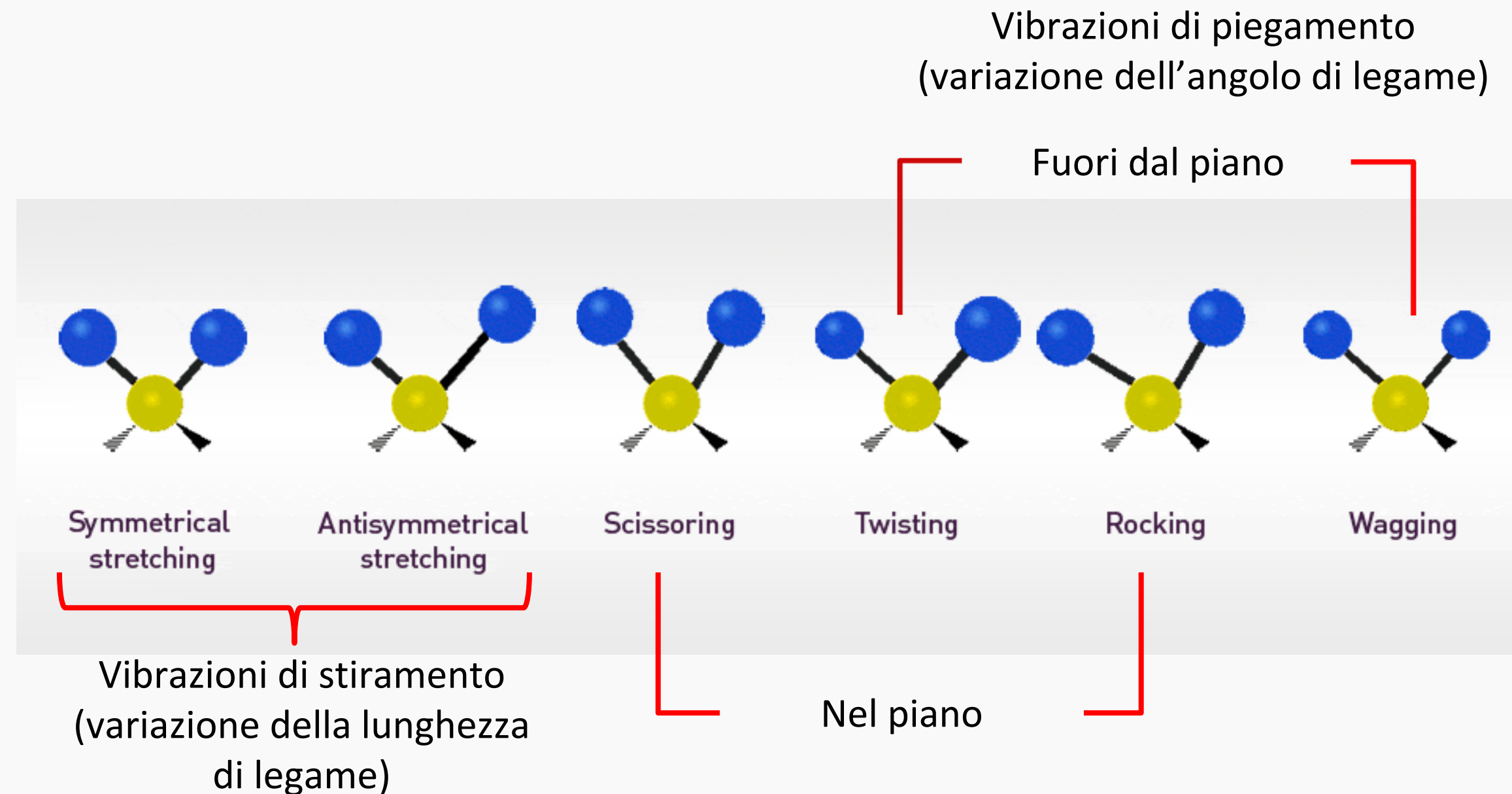




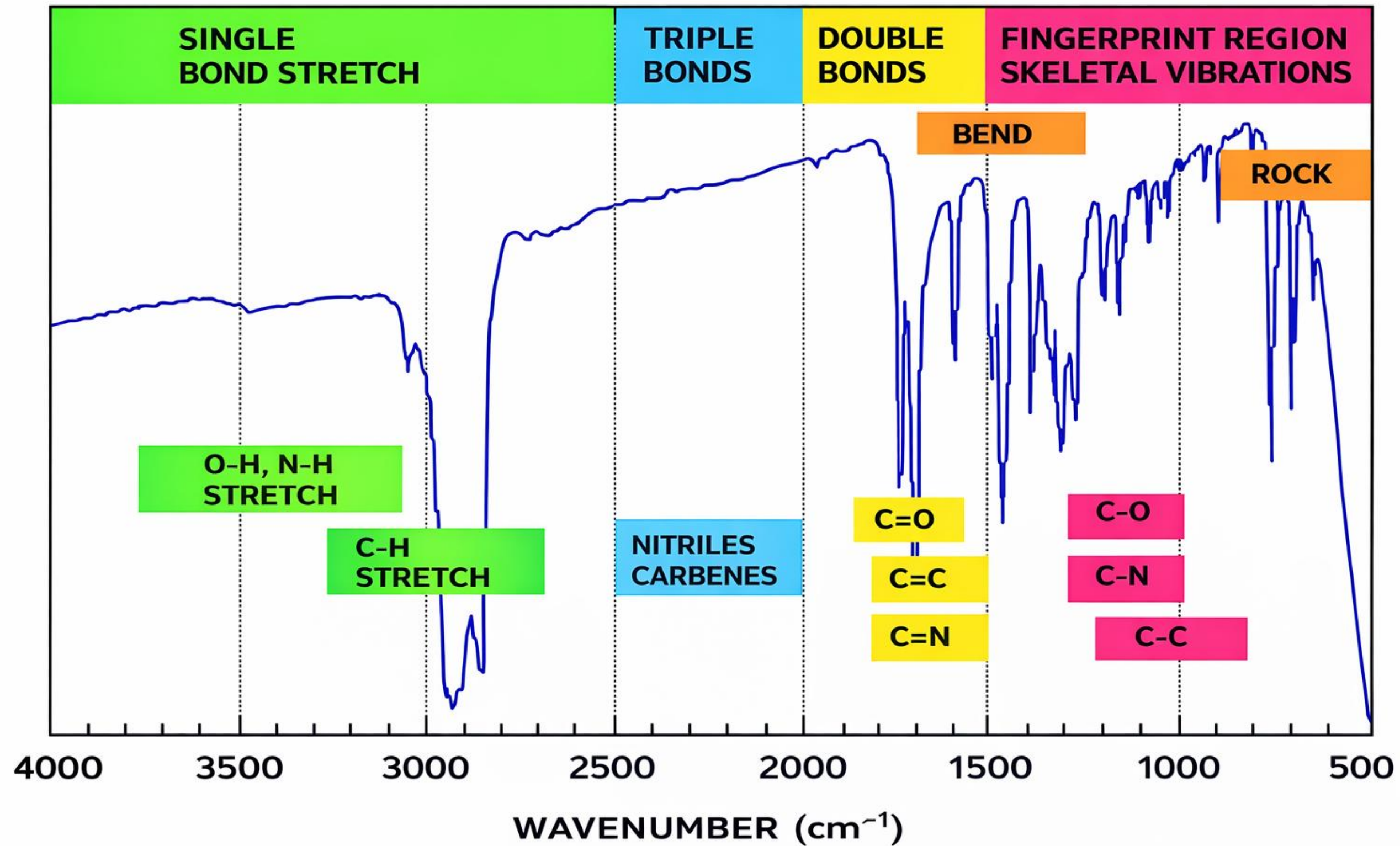
William Weber Coblentz (1897-1962)

I suoi studi permisero di capire che:

- nelle molecole alcuni gruppi di atomi sono associati a specifici assorbimenti nel **medio infrarosso (2.500-50.000 nm)**;
- gli assorbimenti sono dovuti alle vibrazioni dei legami chimici tra gli atomi dei diversi gruppi.

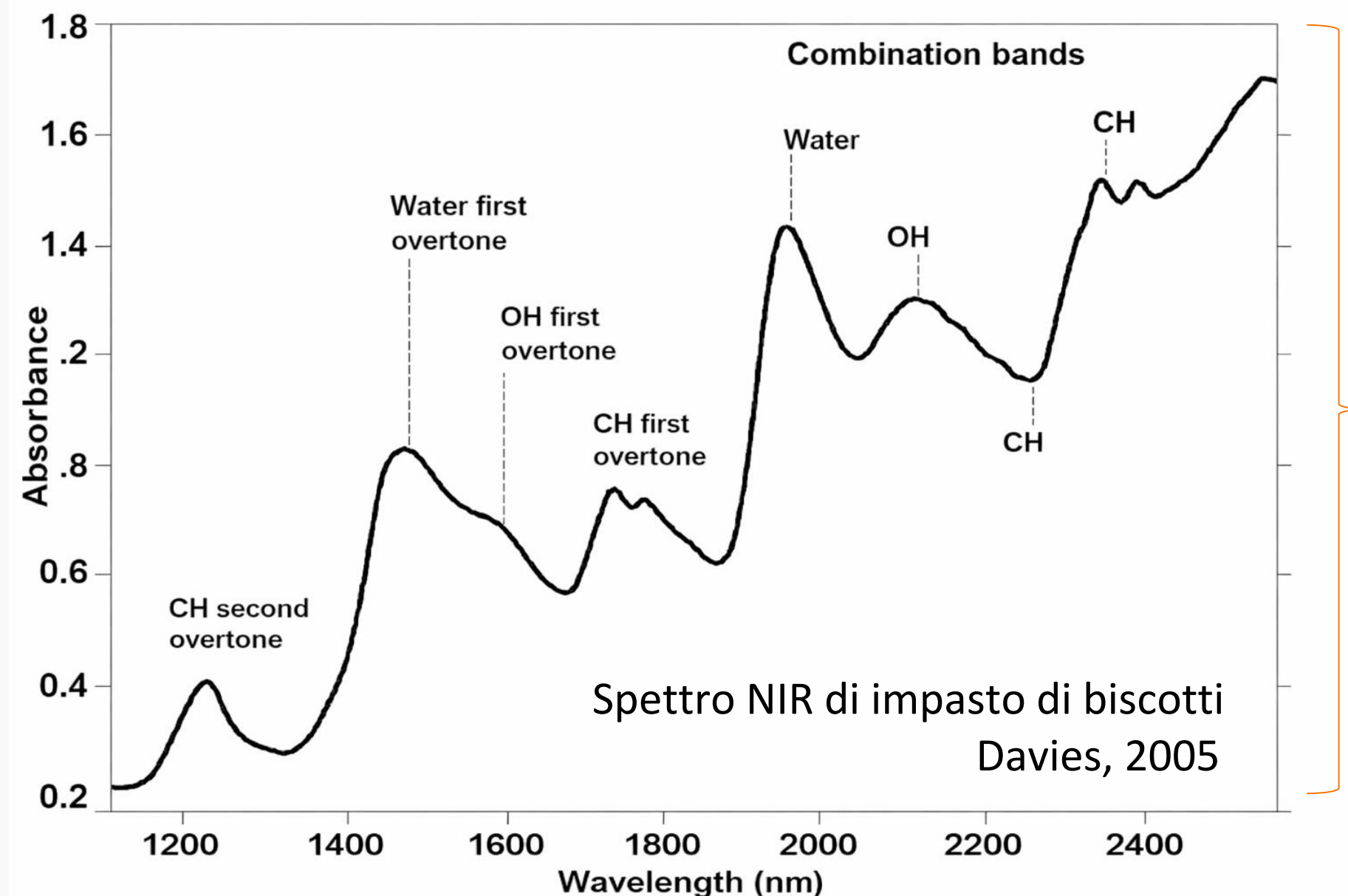


Impronta Digitale ($<1500\text{ cm}^{-1}$):
Zona specifica per vibrazioni di
bending (C-H, C-O, dC-Cl, ecc.)
unica per ogni molecola.



Gli assorbimenti IR permettono di riconoscere i gruppi funzionali perché ogni legame assorbe a numeri d'onda caratteristici: sopra 1500 cm^{-1} prevalgono gli stiramenti, sotto 1500 cm^{-1} le deformazioni.

- Nella spettroscopia NIR (780 – 2500 nm) i segnali osservati non corrispondono alle vibrazioni fondamentali ma ad **overtone (multipli interi della frequenza fondamentale)** e **bande di combinazione (di più vibrazioni nello stesso assorbimento)** di alcuni legami chimici
- I legami più coinvolti sono O-H (acqua), C-H (zuccheri, grassi, proteine) e N-H (proteine e amminoacidi) → NIRS utile per valutare matrici biologiche e alimentari



Spettro NIR non va interpretato come una misura diretta di un singolo composto MA come una risposta complessa che riflette l'insieme delle caratteristiche chimiche e fisiche del campione

Spettroscopia nel medio o vicino infrarosso?

Spettroscopia nel Medio Infrarosso (Mid-IR)

PUNTI DI FORZA

- ✓ Misura le vibrazioni fondamentali
- ✓ Spettri più definiti e specifici
- ✓ Riconosce meglio gruppi funzionali
- ✓ Utile per identificazione chimica e struttura

CRITICITÀ

- ! Richiede più preparazione del campione
- ! Meno adatta ad analisi rapide e in linea
- ! Acqua e componenti interferiscono
- ! Meno pratica per grandi numeri

VS

Spettroscopia nel Vicino Infrarosso (NIR)

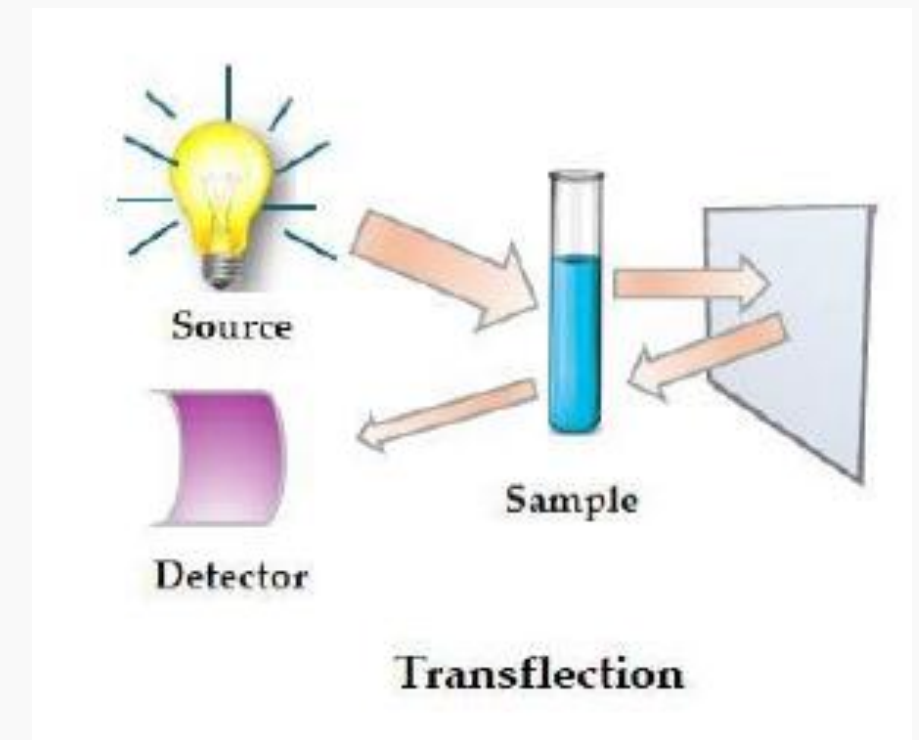
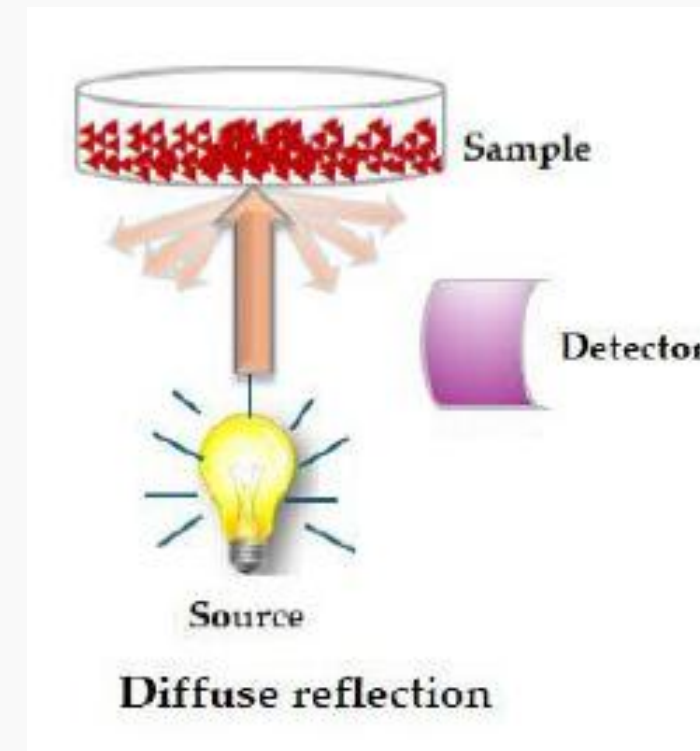
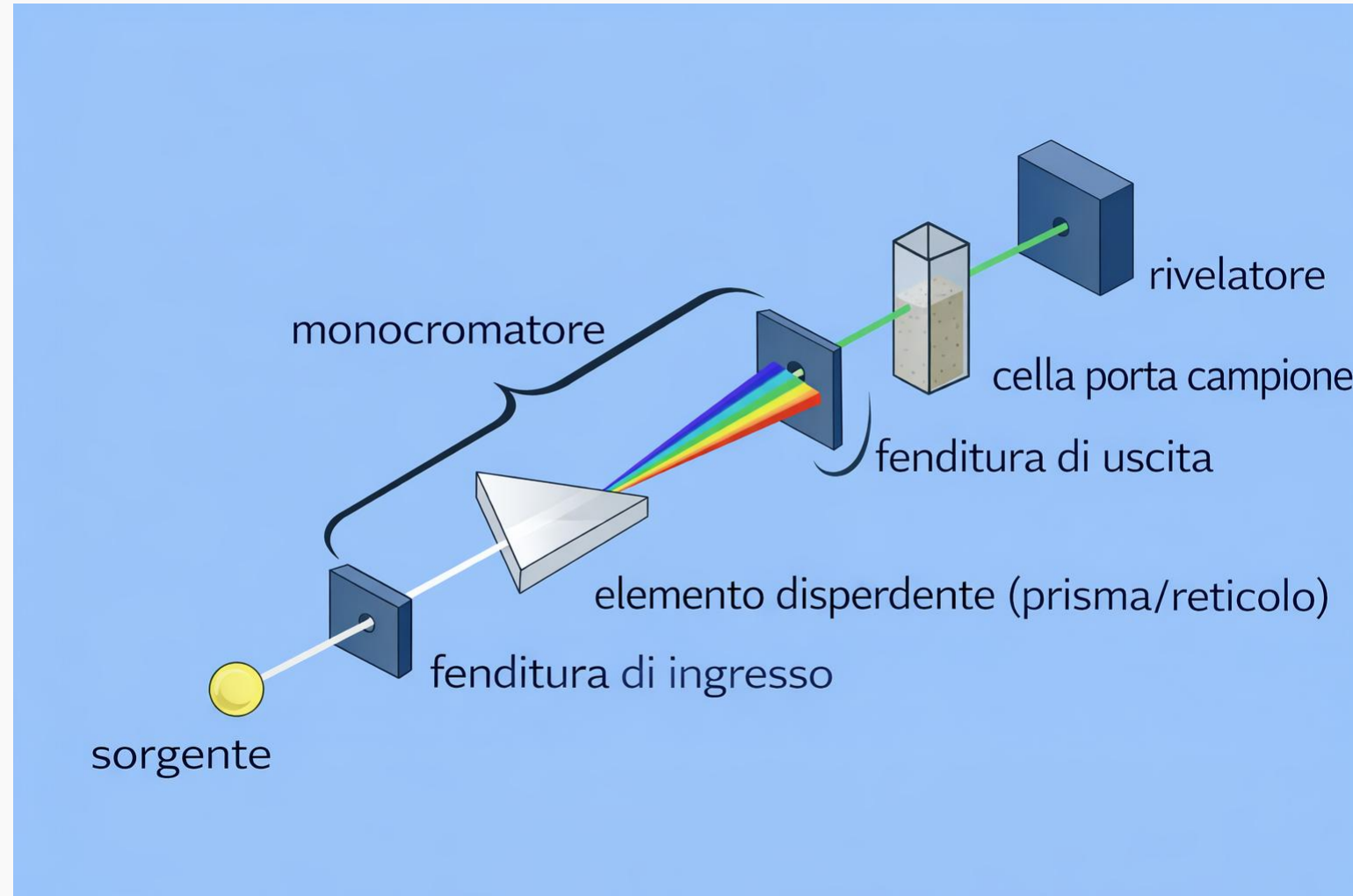
PUNTI DI FORZA

- ✓ Analisi molto rapida
- ✓ Tecnica spesso non distruttiva
- ✓ Poca o nessuna preparazione
- ✓ Ideale per controllo qualità e in linea

CRITICITÀ

- ! Spettri più complessi e sovrapposti
- ! Richiede modelli e calibrazioni
- ! Segnali meno diretti e specifici
- ! Affidabilità calibrazione fondamentale

NIRS: trasmittanza e riflettanza

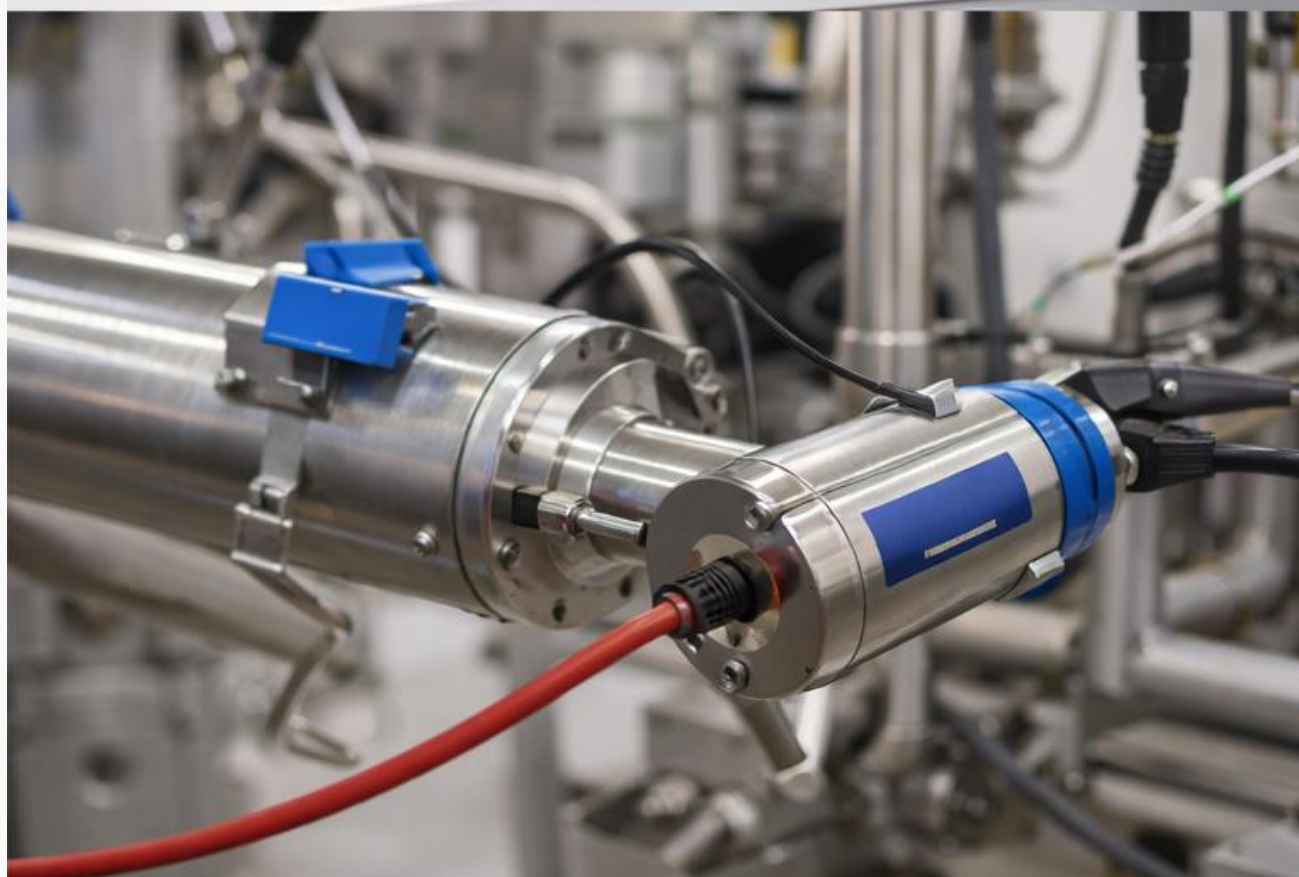


Prella, 2023

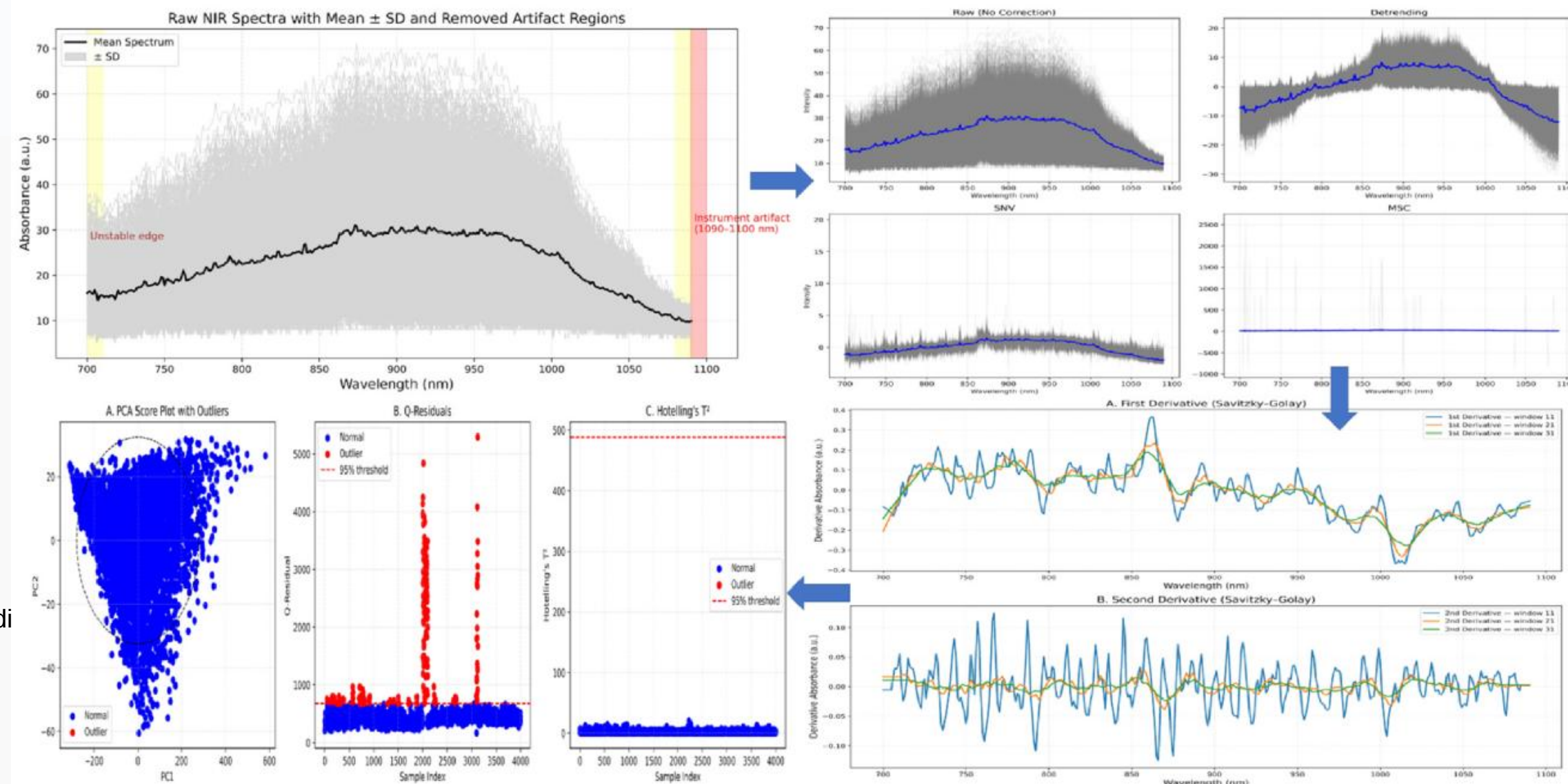
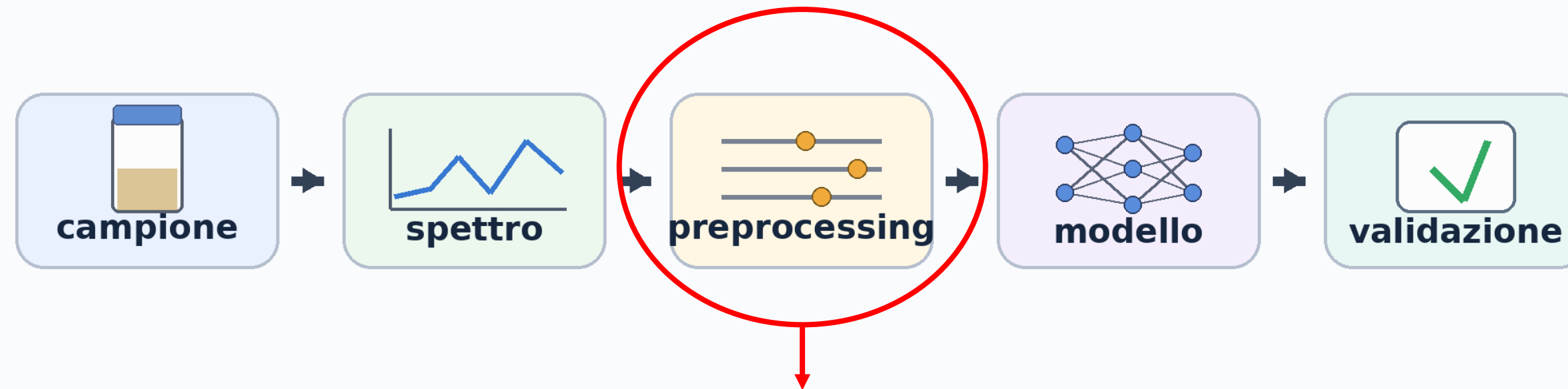
Nella misura in trasmittanza si registra la quota di radiazione che attraversa il campione. Questa configurazione è particolarmente adatta a matrici liquide o semitrasparenti, perché consente di ottenere informazioni che riguardano il volume interno del campione.

Nella misura in riflettanza si registra la radiazione riflessa e diffusa dalla superficie e dagli strati superficiali del campione. Questa modalità è la più usata per matrici solide, polveri, granulati, mangimi, farine, foraggi trinciati e prodotti alimentari solidi. È anche quella che si presta meglio all'uso con strumenti portatili.

Strumenti NIR disponibili



Workflow e chemiometria



1

Compensare gli effetti di scattering **moltiplicativi** e **additivi** causati da variazioni nella **dimensione delle particelle**, nella **rugosità superficiale** e nella **densità di impaccamento** del campione.

2

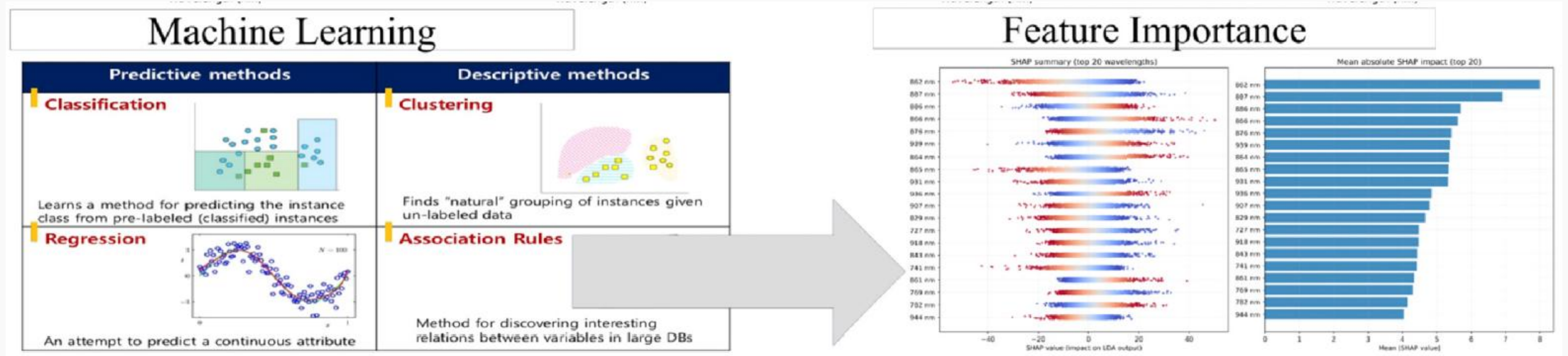
Derivate di primo e secondo ordine di Savitzky-Golay per aumentare la risoluzione spettrale e mettere in evidenza deboli bande di assorbimento nascoste da segnali sovrapposti.

3

Tecniche di rilevamento degli outlier, come la **Principal Component Analysis (PCA)**, vengono integrate nel workflow di preprocessing per identificare spettri influenzati da errori di misura, instabilità del sensore o caratteristiche anomale del campione.

Integrazione con il Machine Learning

- Dopo il preprocessing, metodi di **Machine Learning** permettono di individuare relazioni utili negli spettri NIR elaborati, sia a scopo **predittivo** sia **descrittivo** per l'autenticazione degli alimenti, il rilevamento di adulterazioni, la valutazione della composizione e il monitoraggio della qualità in tempo reale.



Mia et al, 2026

NIRS qualità dei prodotti, tracciabilità, valorizzazione

- I progressi tecnologici degli strumenti NIR e la diffusione di software chemiometrici hanno reso questa tecnica uno dei metodi più utilizzati nel panorama degli strumenti analitici.

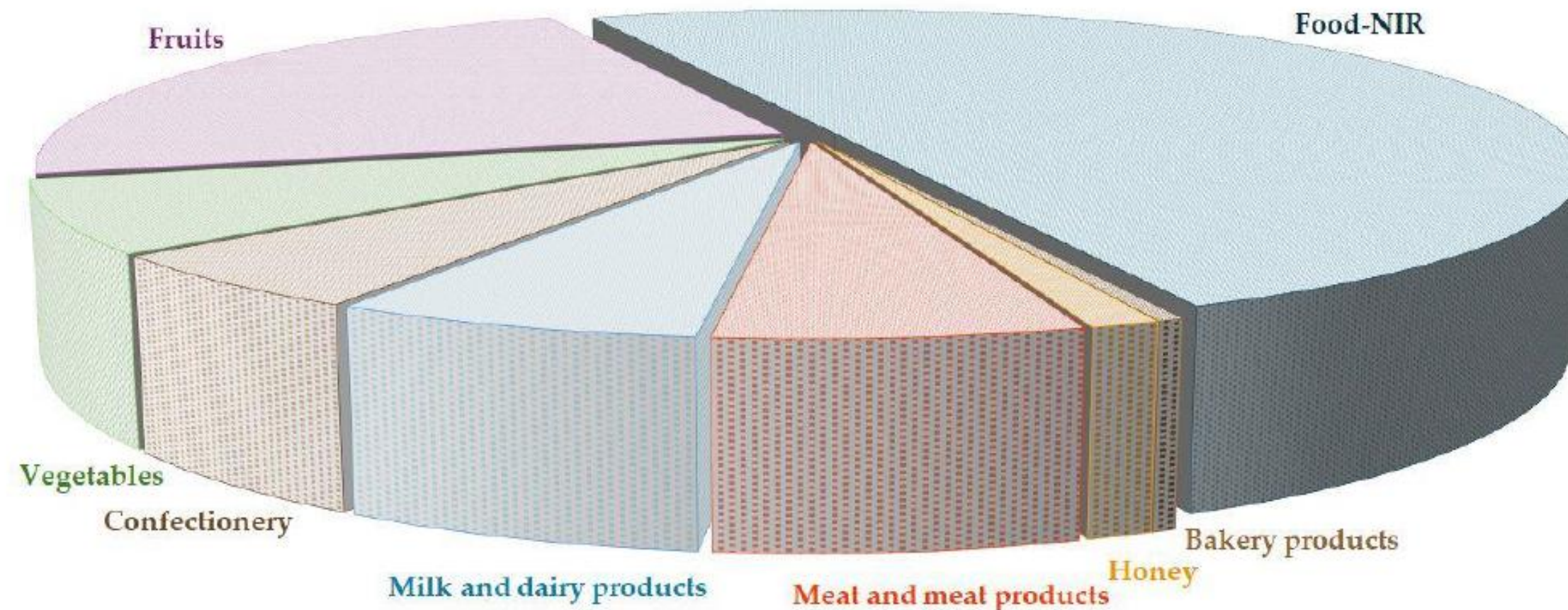


Figure 1. Publications on the topic from 2005 to 2024 (based on Scopus).

Review

The Role of Near-Infrared Spectroscopy in Food Quality Assurance: A Review of the Past Two Decades

Marietta Fodor ^{*}, Anna Matkovits, Eszter Luca Benes  and Zsuzsa Jókai 

Sample	Investigated Parameter	Concentration Range	Chemometrics Data		Root Mean Square Error
			Pre-Treatment, Regression	R ²	
Milk	Sugar—lactose, %	2.06–5.06	RS, PLS	0.83	0.26
		3.30–4.29	1st der., PLS	0.90	0.11
		2.92–5.22	transmittance, 1st der., OSC, RiPLS	0.883	0.115
		3.9–5.2	normalization, PLS	0.92	0.06
		3.09–4.70	ANN	0.8822	0.238
		3.98–5.1	MSC, 1st der., OSC, Rt-RiPLS	0.689	0.077
			Log base, 1st der., OSC, PH-RiPLS	0.644	0.092
			SGS, PLS	0.78	0.11
	raw homogenized	3.97–4.89	SGS, SNV, PLS	0.71	0.12
		4.14–5.25	RS, PLS	0.13	0.87 (RPD)
	Sugar, %				
	sucrose	14.20–43.69	SNV, MC, PDS, PLS	0.7973	5.04
	lactose	0.000–38.99		0.9411	4.22
	Lactose free, %	0–1	1st der., SNV, PLS	0.79	0.1984
	Carbohydrate, g/100 mL	2.5–13.5	SGS, 2nd der., PLS	0.883	0.639
	Fat, %	1.01–7.39	RS, PLS	0.95	0.25
		5.66–11.06	1st der., PLS	0.73	0.66
		2.72–7.94	transmittance, SNV, GA-PLS	0.997	0.043
		0.7–12.3	normalization, PLS	0.998	0.09

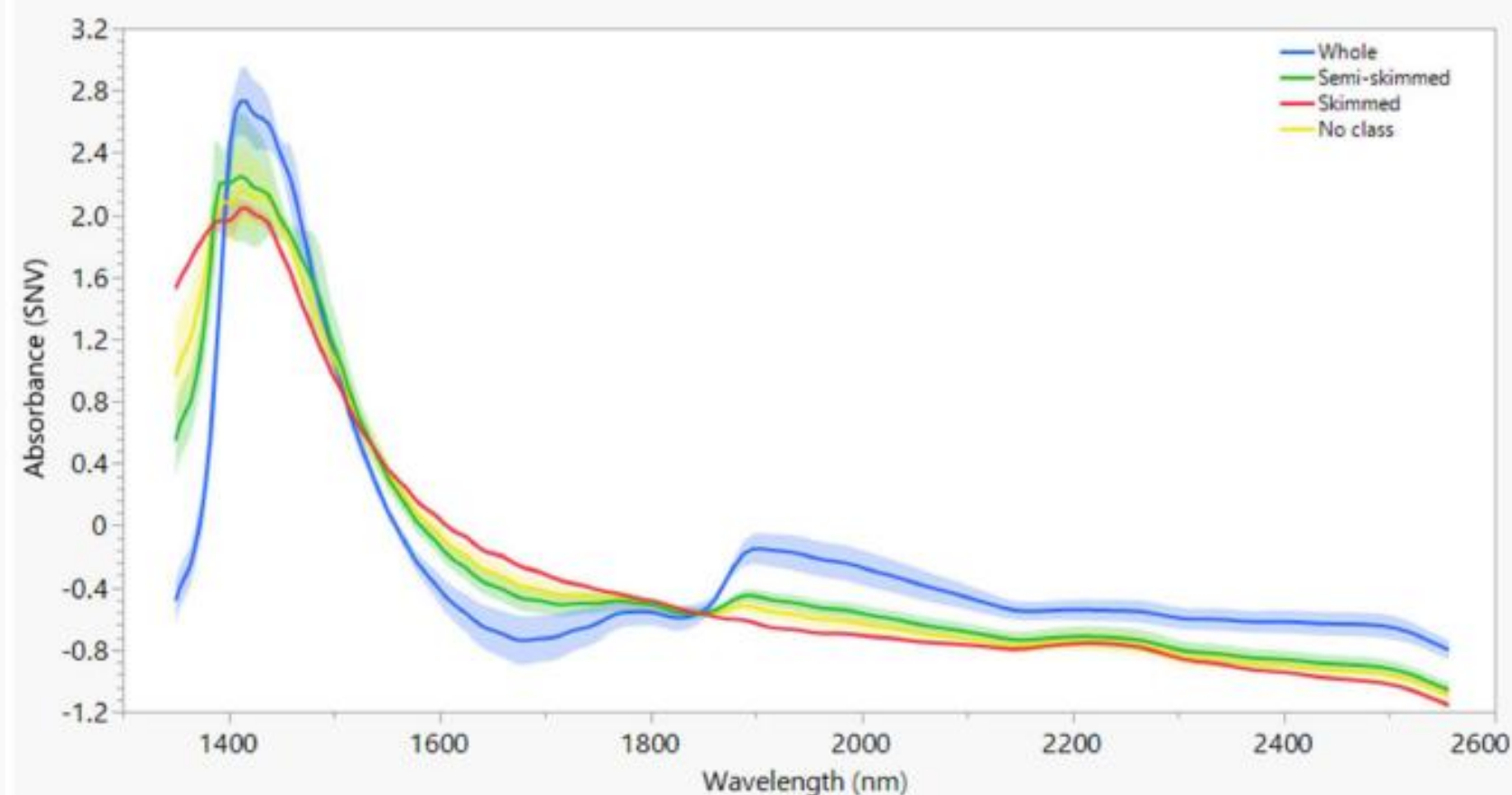
Sample	Investigated Parameter	Concentration Range	Chemometrics Data		
			Pre-Treatment, Regression	R ²	Root Mean Square Error
Beef—fresh	Dry matter, %	21.5–26.8	1st der., SNV, DT, PLS	0.77	0.58
		25.15 ± 1.22	1st der., 2nd der, MPLS	0.92	0.26
	Moisture, %	59.6–72.9	MLR	Grinder diameter (4 mm 8 mm) 0.75/0.81	
		40.53–80.72	SNV, DT, PLS	0.72	2.18
	Lipid, %	6.2–21.7	MLR	Grinder diameter (4 mm 8 mm) 0.73/0.88	
		1.99 ± 1.20	1st der., 2nd der, MPLS	0.99	0.20
		0.08–14.11	1st derivative, SNV, DT, PLS	0.93	1.00
		0.43–46.03	SNV, DT, PLS	0.93	1.25
	Ash, %	0.93–1.2	SNV, DT, PLS	0.66	0.03
		1.00 ± 0.06	1st der., 2nd der, MPLS	0.86	0.09
	Protein, %	18.1–20.7	MLR	Grinder diameter (4 mm 8 mm) 0.23/0.27	
		18.3–22.6	2nd der., PLS	0.82	0.48
		10.36–23.84	1st der., PLS	0.89	0.99
		22.16 ± 0.47	1st der., 2nd der, MPLS	0.99	0.20
	Collagen, mg/100 g	0.31–1.9	2nd der., PLS	0.18	0.30
		18.43 ± 5.30	1st der., 2nd der, MPLS	0.74	8.52

Sample	Investigated Parameter	Concentration Range	Chemometrics Data			
			Pre-Treatment, Regression	R ²	Root Mean Square Error	
Cheese	Fat, %	summer	25.55–50.97	SNV, MPLS	0.936	1.68
		winter	19.97–61.29	MSC, MPLS	0.871	3.23
		lyophilized	19.1–55.6	MSC, 1st der., PLS	0.99	1.0
	Total fatty acid, %	total FA	47.57–472.44	SNV, PLS; SVM	0.86; 0.59	28.87; 24.40
		SFA	33.22–325.04		0.84; 0.88	21.66; 18.32
		MUFA	10.02–114.1		0.75; 0.83	9.11; 7.47
		PUFA	0.00–10.15		0.0; 0.1	2.78; 2.32
		SCFA	2.54–26.95		0.80; 0.89	1.94; 1.36
		MCFA	7.14–55.51		0.22; 0.55	5.34; 4.88
		BUFA	0.9–5.29		0.78; 0.79	0.61; 0.55
		Protein, %—lyophilized			24.7–60.7	SLS, SGS, 1st der., PLS
	Minerals, %	Ca	0.229–0.510	PLS	0.75	0.02
		K	0.023–0.167		0.37	0.17
		Mg	0.009–0.020		0.82	0.00
		Na	0.024–0.290		0.89	0.02
		P	0.187–0.370		0.82	0.01
		Classification	geographical origin		normalization, FDA	accuracy:
	Austrian: 100%					
	Finnish: 66.7%					
		German: 76.9%				
		French: 83.3%				
		Swiss: 94.7%				
		summer or winter	DPLS	Accuracy 97 and 96%		
		Species of origin	SNV, SG, PCA	Accuracy 76%		

Article

Rapid Classification of Milk Using a Cost-Effective Near Infrared Spectroscopy Device and Variable Cluster–Support Vector Machine (VC-SVM) Hybrid Models

Eleonora Buoio ¹, Valentina Colombo ², Elena Ighina ¹ and Francesco Tangorra ^{1,*}



Obiettivo:

Classificazione rapida del latte in conformità al Regolamento UE n. 1308/2013, senza alcun pretrattamento del campione.

Table 6. Classification performance of the linear kernel for each milk class.

Milk Class	Training Set ($n = 37$)			Validation Set ($n = 36$)		
	Sensitivity (%)	Specificity (%)	MCC	Sensitivity (%)	Specificity (%)	MCC
Whole	100	100	1	100	100	1
No class	100	100	1	100	94.1	0.69
Semi-skimmed	100	100	1	94.4	100	0.97
Skimmed	100	100	1	83.3	100	0.90

Table 7. Classification performance of the RBF kernel for each milk class.

Milk Class	Training Set ($n = 37$)			Validation Set ($n = 36$)		
	Sensitivity (%)	Specificity (%)	MCC	Sensitivity (%)	Specificity (%)	MCC
Whole	100	100	1	100	100	1
No-class	100	94.1	0.75	100	94.1	0.69
Semi-skimmed	94.4	100	0.95	94.4	100	0.95
Skimmed	100	100	1	100	100	1

Article

Handheld NIR Spectroscopy Combined with a Hybrid LDA-SVM Model for Fast Classification of Retail Milk

Francesco Maria Tangorra , Annalaura Lopez * , Elena Ighina , Federica Bellagamba 
and Vittorio Maria Moretti 

Obiettivo:

valutare l'efficacia di un dispositivo NIR miniaturizzato, combinato con algoritmi di ML nel discriminare quattro tipologie commerciali di latte:

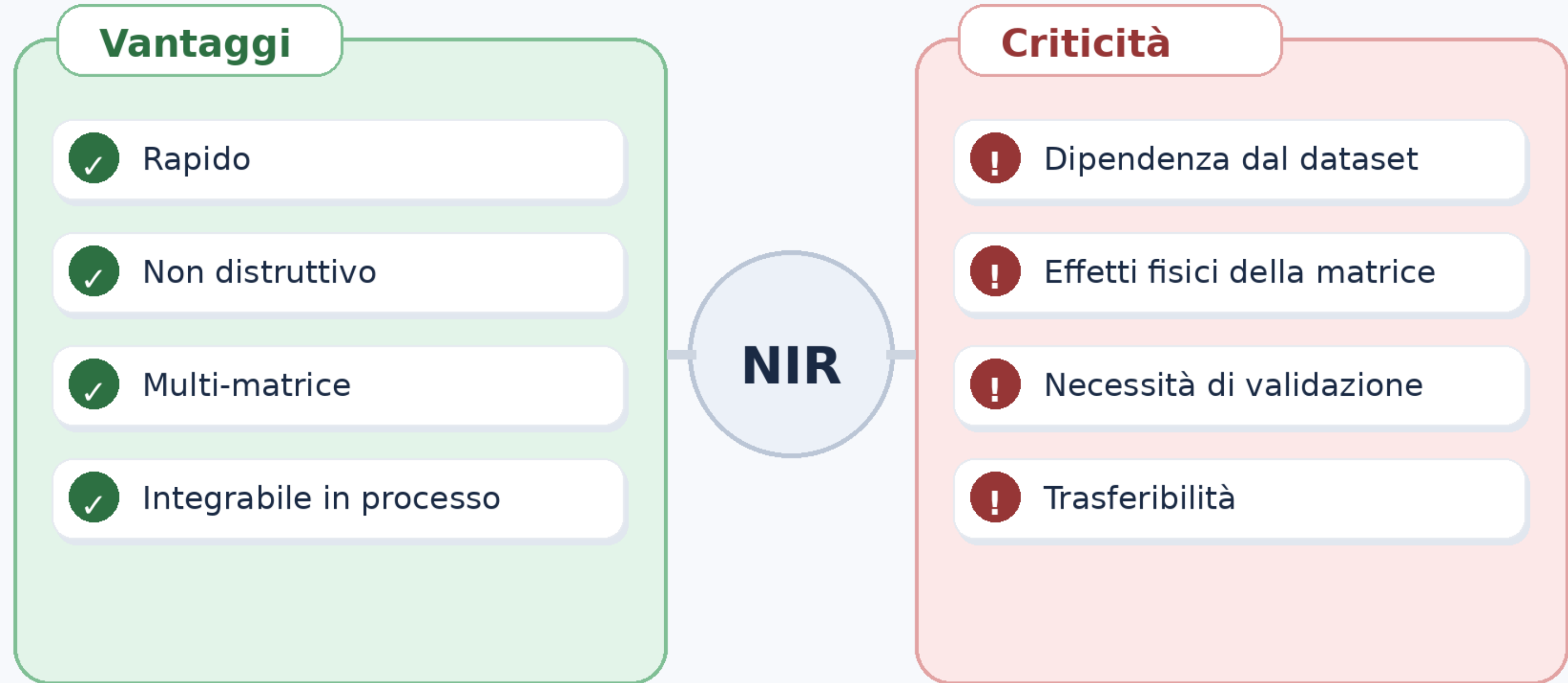
- latte fresco di alta qualità
- latte di montagna
- latte a lunga conservazione
- latte fieno

Table 5. Classification performance of the SVM based on LDA-NIR data for each milk class.

Training Set (n = 55)				Validation Set (n = 19)			
Milk Class	Sensitivity (%)	Specificity (%)	MCC	Milk Class	Sensitivity (%)	Specificity (%)	MCC
HQ	78.6	90.2	0.67	HQ	80.0	92.9	0.73
MM	83.3	97.7	0.84	MM	75.0	93.3	0.68
ESL	93.3	92.5	0.83	ESL	60.0	92.9	0.57
HM	71.4	95.2	0.70	HM	80.0	85.7	0.62

HQ = high-quality fresh milk; MM = mountain milk; ESL = extended shelf-life milk; HM = hay milk.

In sintesi...



Conclusioni

1

Tecnica versatile

2

Utile per qualità, tracciabilità e valore

3

Centrale la chemiometria

4

Importante la scelta dello strumento

5

Prospettive

miniaturizzazione e monitoraggio in tempo reale

Per chi volesse approfondire...



1. Davies AMC. An introduction to near infrared spectroscopy. NIR News. 2005;16(7):9-11. doi:10.1255/nirn.853
2. Prella V. Studio dell'efficacia dei pretrattamenti spettrali nella regione del vicino infrarosso per mitigare gli effetti di scattering dovuti alla granulometria dei campioni solidi [thesis]. Università di Genova; 2023.
3. Mia N, Hashem MA, Halim MA, et al. Application of NIR spectroscopy with machine learning in the food industry: a comprehensive review. Food Physics. 2026;3:100089. doi:10.1016/j.foodp.2026.100089
4. Fodor M, Matkovits A, Benes EL, et al. The role of near-infrared spectroscopy in food quality assurance: a review of the past two decades. Foods. 2024;13(21):3501. doi:10.3390/foods13213501
5. Buio E, Colombo V, Ighina E, Tangorra F. Rapid classification of milk using a cost-effective near infrared spectroscopy device and variable cluster-support vector machine (VC-SVM) hybrid models. Foods. 2024;13(20):3279. doi:10.3390/foods13203279
6. Tangorra FM, Lopez A, Ighina E, Bellagamba F, Moretti VM. Handheld NIR spectroscopy combined with a hybrid LDA-SVM model for fast classification of retail milk. Foods. 2024;13(22):3577. doi:10.3390/foods13223577



Grazie per l'attenzione