

## METODI CHEMIOMETRICI PER L'ELABORAZIONE DI DATI SPETTROSCOPICI NEL CONTESTO DEL MONITORAGGIO DI PROCESSO

Marina Cocchi

*Dipartimento di Chimica, Università di Modena e Reggio Emilia, Via Campi 183, 41100  
Modena, marina.cocchi@unimore.it*

Negli anni più recenti, si è assistito ad un progressivo cambiamento nel modo di affrontare lo studio e la caratterizzazione dei sistemi complessi [1]. Dalla formulazione di una stretta ipotesi di relazione di causa ed effetto, che implica che le relazioni studiate siano direttamente osservabili, da valutatori esperti, attraverso l'analisi di dati raccolti in modo univariato, relativi a sottoinsiemi del sistema studiato, accuratamente selezionati sulla base di conoscenze *a priori*, ci si è rivolti ad un punto di vista più olistico, in cui l'intero fenomeno/processo (e le sue molte fasi) sono sotto osservazione indiretta. Ciò comporta che molti esperimenti siano effettuati in condizioni controllate e la caratterizzazione del sistema sia la più estesa possibile, al fine di estrarre, mediante un'attenta analisi multivariata dei dati, le informazioni rilevanti. In altre parole, stiamo andando nella direzione in cui le relazioni di causa-effetto sono suggerite dall'analisi dei dati; vale a dire che l'informazione e la sua razionalizzazione è ottenuta sulla base della comprensione delle relazioni latenti tra le variabili monitorate come evidenziato dall'analisi dei dati *a posteriori* [2].

Due elementi principali hanno determinato questa nuova prospettiva nell'approccio scientifico: in primo luogo, l'enorme sviluppo delle tecniche di analisi strumentale ifenate, dall'accoppiamento cromatografia-spettrometria, all'acquisizione di immagini iperspettrali, alle spettroscopie pluridimensionali, fino ai dispositivi a serie di sensori e ai microarrays. In secondo luogo, la grande diffusione dei computers, insieme con la progressiva diminuzione dei costi e la maggiore capacità computazionale.

Infine, una forza trainante in questa direzione è dovuta ai nuovi ordinamenti legislativi, che obbligano le industrie a dimostrare che l'intero processo produttivo è sotto controllo, attraverso al normativa PAT [3], ad esempio, nel settore farmaceutico o in altri contesti di produzione.

In questa nuova prospettiva, è evidente che il ruolo della spettroscopia analitica e, soprattutto, della chemiometria è sempre più rilevante. Infatti, mentre le nuove possibilità per la ricerca scientifica sono davvero affascinanti, il rischio di interpretazioni fuorvianti e false scoperte è molto realistico. Come recentemente sottolineato da Lavine e Workman [1]: "con un opportuno processamento e un po' di interpretazione creativa, si può trarre qualsiasi conclusione da grandi quantità di dati".

Obiettivo di questa presentazione è di fornire una panoramica dei metodi chemiometrici utilizzati nel monitoraggio di processo[4-6], per la costruzione e interpretazione delle carte di controllo multivariate (ad es Figura 1); sottolineando i vantaggi offerti: i) dall'approccio multivariato rispetto al controllo di singole variabili di processo distinte; ii) dall'uso del Disegno Sperimentale (DOE), e iii) dall'efficacia della rappresentazione dei dati mediante le

variabili latenti (PCA, PLS). Saranno anche trattati metodi multi-way (PARAFAC, TUCKER) che rappresentano un nuovo strumento per l'analisi dei dati prodotti per *batches*. In particolare l'attenzione sarà rivolta al monitoraggio mediante spettroscopia infrarossa con illustrazione di case studies dove sono state applicate opportuni metodi di pre e post processamento dei segnali strumentali. Trattando sia applicazioni originali (monitoraggio di produzione di materiali per uso biomedicale [7-8] e monitoraggio di un processo di produzione di pane industriale [9]), che esempi di letteratura.

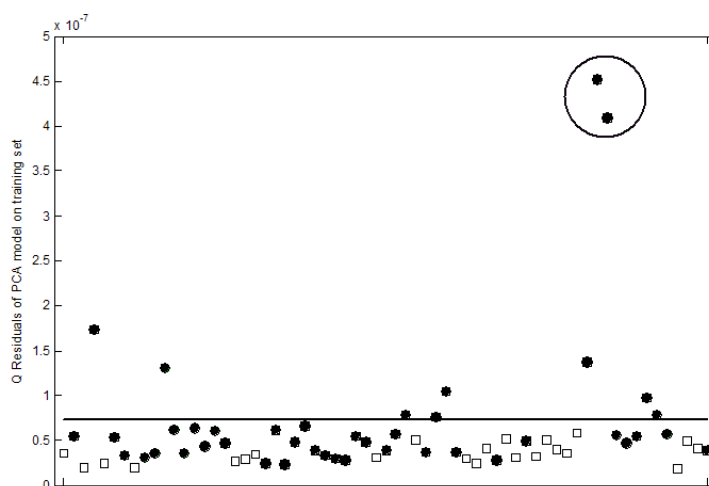


Figure 1 Multivariate control chart for industrial dough based on NIR data

## Riferimenti

1. B. Lavine, J. Workman, *Anal. Chem.* 2006, 78, 4137.
2. S. Wold, M. Sjöström, *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, 1998, 44, 3-14.
3. US Food and Drug Administration, Centre for Drug Evaluation and Research (2004) *Process Analytical Technology (PAT) initiative*, [www.fda.gov/cder/OPS/PAT.htm](http://www.fda.gov/cder/OPS/PAT.htm); *Guidance for Industry PAT* (2004), [www.fda.gov/cder/guidance/published.html](http://www.fda.gov/cder/guidance/published.html)
4. Kourti T, *Crit. Rev. in Anal. Chem* (2006), 36, 257-278.
5. Wise, B.M and N. B. Gallagher, *J. Process Control*, 6(6), 329-348, 1996
6. D.J., Louwerse A.K., Smilde., *Chemical Engineering Science*, 55 (2000) 1225-1235.
7. M.L. Bodecchi, C. Durante, M. Cocchi, M. Manfredini, M. Malagoli, A. Marchetti, *Applied Spectroscopy*, 2008, submitted
8. M. Cocchi, M. Manfredini, L.M. Bodecchi, G. Ferrari, M. Malagoli, F. Galavotti, A. Marchetti, *Anal. Chim. Acta*, 2005, 554, 207-217.
9. A. Ulrici, M. Li Vigni, C. Durante, G. Foca, P. Belloni, B. Brettagna, T. De Marco and M. Cocchi, *JNIRS*, 2008, in press.