

Abstract

Questo lavoro di tesi fa parte di un più ampio progetto svolto dal gruppo di ricerca Chemometrics and Analytical Chemistry (Department of Food Science, Università di Copenhagen) in collaborazione con l'Università di Modena e Reggio Emilia. Il lavoro, comprendente l'utilizzo di diverse matrici alimentari, tecniche analitiche come la gas cromatografia e metodi di analisi multivariata, è stato svolto presso il Department of Food Science di Copenhagen, durante un'esperienza di Erasmus+ Traineeship della durata di sei mesi.

La tesi riguarda lo sviluppo e l'applicazione di PARADISE (PARAFAC2 based Deconvolution and Identification System), un software innovativo (basato su algoritmi chemiometrici multi-way e deep learning), utilizzato come strumento di analisi dei dati che consente la risoluzione e l'assegnazione dei picchi cromatografici ottenuti mediante gascromatografia accoppiata a spettroscopia di massa in un'analisi di tipo untargeted. I dati ottenuti da queste tecniche risultano molto spesso estremamente complessi da elaborare coi software convenzionali a causa di diversi problemi che si verificano durante la fase di acquisizione. PARADISE offre una soluzione per elaborare questo tipo di strutture di dati, in modo più rapido ed efficiente. Esso è infatti in grado di deconvolvere i diversi segnali presenti, estraendo solo le informazioni chimiche di interesse. Il software permette inoltre l'integrazione simultanea di più cromatogrammi alla volta, riducendo enormemente il tempo di lavoro. Partendo da questa premessa, il focus principale del progetto è stato lo sviluppo e implementazione di uno step specifico nella routine del software: lo step di selezione degli intervalli. All'interno della routine di PARADISE, questo step risulta essere il più lento e complesso. Si è pertanto sviluppato un algoritmo che ne permettesse l'automatizzazione. L'algoritmo è stato testato su due set di dati di riferimento: un set di campioni di polveri di cacao e un set di campioni di whisky; e la sua ottimizzazione è stata possibile grazie all'utilizzo di un disegno sperimentale e di metodi di analisi multivariata. Lo studio ha portato all'identificazione di un numero maggiore di sostanze chimiche rispetto alla precedente versione del software.

Un'altra parte del progetto ha riguardato lo studio dei profili aromatici dei campioni di cacao e whisky utilizzati per testare le funzionalità della funzione di auto-selezione degli intervalli. Le due matrici sono state scelte in quanto facenti parte di studio relativo alle frodi alimentari. Sono stati studiati 16 campioni di polveri di cacao e 54 campioni di whisky. Grazie a PARADISE e all'analisi dei componenti principali (PCA), è stato possibile ottenere in breve tempo un'ampia

caratterizzazione e distinzione delle diverse tipologie di campioni in base alle loro caratteristiche aromatiche peculiari.

Questo lavoro è stato sviluppato con l'idea di creare un "ponte" tra la chemiometria e chimica analitica. La sinergia tra queste due branche della chimica è infatti al giorno d'oggi sempre più cruciale nel campo della ricerca. Se gli strumenti analitici, sempre più performanti, ci permettono di accedere a quantità di dati sempre più consistenti, i metodi di analisi multivariata ci permettono di estrapolare l'informazione realmente utile contenuta nei dati.