Exploring common and distinct information among three different kinds of NIR instruments by means of chemometrics

N. Cavallini1\*, A. Giraudo1, F. Pennisi2, G. Esposito2, M. Pezzolato2, F. Savorani1

1 Department of Applied Science and Technology, Politecnico di Torino, Corso Duca degli Abruzzi 24 – 10129 Torino, Italy

2 Istituto Zooprofilattico Sperimentale del Piemonte, Liguria e Valle d'Aosta, via Bologna 148 – 10154 Torino, Italy

\*email: nicola.cavallini@polito.it

English version:

Food fraud is an old but still common and widespread problem, that affects almost any type of food commodity that is sold on the market. Products may be mislabelled or counterfeit and, in many cases, it can be very difficult to detect these illegal practices. For this reason, quick and reliable methods are needed for efficiently tackling this problem. Due to its ease of use and rapidity, near-infrared (NIR) spectroscopy is particularly suitable for the purpose. In this study, the subtle differences between fresh and thawed cephalopods were investigated, using different NIR instruments to collect the data and different chemometric approaches to perform the data analysis.

Fifty fresh cephalopods specimens of both cuttlefish (*Sepia officinalis*) and musky octopus (*Eledone spp*.) were collected directly at the food distribution warehouse and immediately analysed at refrigeration temperature (~5°C). Then, the specimens were kept frozen at –20°C for at least 48 hours and eventually thawed and analysed once again. Data collection was performed by measuring the same specimens using three different NIR spectrometers: one portable low-cost instrument (SCiO by Consumer Physics), one portable medium-high-cost instrument (MicroNIR by Viavi) and one benchtop instrument (MPA by Bruker). The common and distinct information among the three data sources was investigated by means of a mid-level data fusion approach (Borràs et al., 2015) and by means of methods such as CovSel (Covariance Selection - Roger et al., 2011) and ComDim (Common Dimensions - Cariou et al., 2019).

Differently from other traditional techniques employed for counteracting fraud, NIR spectroscopy coupled with chemometrics proves a robust approach for distinguishing between fresh and frozen cephalopods. Similarities and differences among the three NIR datasets, unravelled by the tested chemometric tools, reflect the building characteristics of each instrument and provide a complementary picture of the specimens’ evolution during the freeze-thaw process.

**Keywords:** chemometrics, data fusion, cephalopods, authenticity, NIR instruments

**Acknowledgements:** This study is supported by the Italian Ministry of Health, under Grant nr. IZSPLV 02-18 - RC.

REFERENCES

Borràs, E., Ferré, J., Boqué, R., Mestres, M., Aceña, L., Busto, O., 2015. Data fusion methodologies for food and beverage authentication and quality assessment – A review. Anal. Chim. Acta 891, 1–14. https://doi.org/10.1016/j.aca.2015.04.042

Cariou, V., Jouan-Rimbaud Bouveresse, D., Qannari, E.M., Rutledge, D.N., 2019. ComDim Methods for the Analysis of Multiblock Data in a Data Fusion Perspective, in: Data Handling in Science and Technology. Elsevier Ltd, pp. 179–204. https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63984-4.00007-7

Roger, J.M., Palagos, B., Bertrand, D., Fernandez-Ahumada, E., 2011. CovSel: Variable selection for highly multivariate and multi-response calibration. Application to IR spectroscopy. Chemom. Intell. Lab. Syst. 106, 216–223. https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2010.10.003

Versione in italiano:

Le frodi alimentari costituiscono un problema antico ma tutt’ora diffuso, che riguarda la quasi totalità dei prodotti alimentari in commercio. Le informazioni riportate in etichetta possono venire contraffatte, e in molti casi può essere molto difficile individuare tali pratiche illegali. Per affrontare questo problema sono quindi necessari metodi veloci e affidabili. La spettroscopia nel vicino infrarosso (NIR), in virtù della sua velocità e semplicità d’impiego risulta particolarmente adatta allo scopo prefisso. Nel presente lavoro si sono investigate le sottili differenze che intercorrono fra cefalopodi freschi e decongelati, utilizzando differenti strumentazioni NIR per raccogliere i dati e diversi approcci chemiometrici per sviluppare l’analisi dei dati.

Cinquanta seppie (*Sepia officinalis*) e cinquanta moscardini (*Eledone spp*.) sono stati raccolti direttamente presso l’impianto di distribuzione e analizzati immediatamente a temperatura di refrigerazione (~5°C). I campioni sono stati quindi posti e mantenuti in congelatore a –20°C per un periodo minimo di 48 ore e successivamente decongelati e nuovamente analizzati. Le analisi sono state ripetute sugli stessi campioni utilizzando tre strumenti NIR: uno portatile a basso costo (SCiO, Consumer Physics), uno portatile di costo medio-alto (MicroNIR, Viavi) ed uno da banco (MPA, Bruker). Tecniche di analisi dei dati come l’approccio di mid-level data fusion (Borràs et al., 2015) e i metodi CovSel (Covariance Selection - Roger et al., 2011) e ComDim (Common Dimensions - Cariou et al., 2019) sono state impiegate per investigare l’informazione comune e distinta contenuta nei tre set di dati.

A differenza da altre tecniche tradizionali a contrasto delle frodi, la spettroscopia NIR abbinata agli strumenti della chemiometria fornisce un approccio robusto per distinguere fra cefalopodi freschi e decongelati. Similitudini e differenze fra i tre dataset NIR, ottenute mediante le tecniche chemiometriche testate, riflettono le caratteristiche costruttive dei relativi strumenti e forniscono una rappresentazione complementare dell’evoluzione dei campioni durante il processo di congelamento-decongelamento.