

Exploatarea datelor spectrale în vederea identificării materialelor, amprentei chimice și a elementelor de fraudă din obiectele de artă cu policromie (INFRA-ART)

Contract Nr. PD 29 / 2020
(PN-III-P1-1.1-PD-2019-1099)

REZUMATUL PROIECTULUI

Proiectul de cercetare postdoctorală INFRA-ART (Exploatarea datelor spectrale în vederea identificării materialelor, amprentei chimice și a elementelor de fraudă din obiectele de artă cu policromie, PN-III-P1-1.1-PD-2019-1099), valorifică infrastructura de excelență din cadrul INOE 2000 propunând o abordare experimentală multianalitică ce integrează tehnici spectroscopice complementare, cu analiza imagistică de ultimă generație, respectiv cu tehnici de analiză multivariată, în investigarea operelor de artă cu policromie. **Implementat începând cu septembrie 2019**, proiectul INFRA-ART a urmărit **4 obiective specifice**: (O1) Dezvoltarea unei librării spectrale integrate specializată pe o gamă largă de materiale de artă; (O2) Dezvoltarea unei metodologii analitice pentru identificarea și discriminarea materialelor (studiu pigmenți istorici); (O3) Dezvoltarea unui algoritm pentru clasificarea și identificarea automată a materialelor picturale (utilizând tehnici de analiză multivariată); (O4) Dezvoltarea unor hărți de distribuție spațială a pigmentilor la nivelul straturilor picturale în lucrări de artă.

Unul dintre **principalele rezultate** obținute în cadrul proiectului îl reprezintă **dezvoltarea, implementarea și optimizarea librării spectrale INFRA-ART**, o resursă *open access*, disponibilă online (<https://infraart.inoe.ro/>), ce vine în sprijinul specialiștilor din domeniu ce operează cu tehnici spectroscopice FTIR, XRF, Raman. Sub aspectul rezultatelor cercetării, a fost realizat un **studiu tehnic** privind caracterizarea și discriminarea pigmentilor de pământ prin tehnici spectroscopice complementare, respectiv a fost dezvoltat un **algoritm de clasificare** automată a pigmentilor de pământ funcție de proveniență prin analiza multivariată a seturilor de date spectrale. O serie de artefacte arheologice cu policromie (fragmente de pictură murală) cât și o serie de lucrări de artă (tablouri de șevalet) au fost investigate printr-o abordare integrativă minim-invazivă ce a inclus tehnici spectroscopice complementare și tehnici imagistice, în scopul unei caracterizării avansate a materialelor și tehnicii picturale, dar și în scopul dezvoltării de **noi soluții analitice pentru caracterizarea și diagnosticarea operelor de artă** ce prezintă policromie complexă. Prin coroborarea datelor spectrale în mai multe cu puncte cu tehnicile de mapare oferite de imagistica hiperspectrală (set de date tratate prin algoritmi de clasificare statistici) au fost generate **hărți de distribuție spațială a pigmentilor** la nivelul suprafețelor picturale de interes. Au fost studiate detalii tehnice privind execuția lucrărilor (obținerea tonurilor cromatice, suprapunerea straturilor picturale, execuția desenului pregătitor), și a fost documentată în detaliu paleta cromatică și semnătura chimică a pigmentilor identificați.

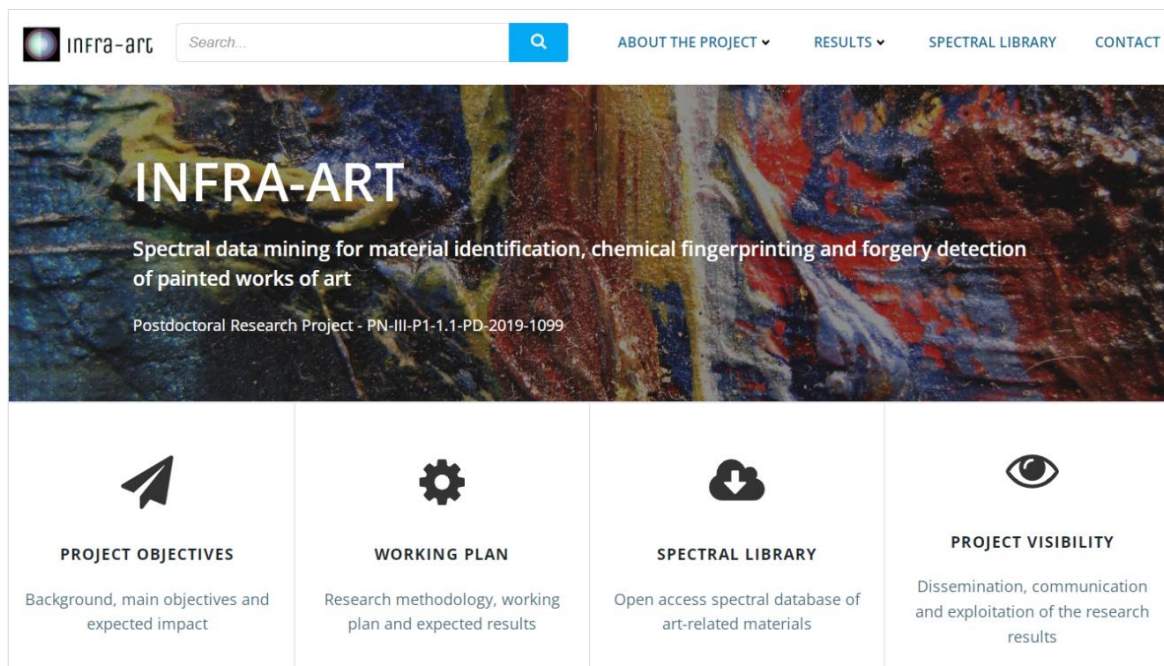
Principalii indicatori de rezultat realizați în cadrul proiectului INFRA-ART includ: **1 produs informatic** - librărie spectrală specializată pe materiale de artă ([INFRA-ART Open Access Spectral Library](#)), **2 articole ISI publicate** în jurnale clasate în *zona galbenă (Q2)*, respectiv **1 articol ISI în evaluare** la o revistă indexată *Arts & Humanities Citation Index*, **3 comunicări în cadrul unor conferințe internaționale** de

prestigiu (5th International Conference on Innovation in Art Research and Technology, 11th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy). Au fost obținute de asemenea **două distincții** în cadrul unor târguri și saloane internaționale de invenție și inovare pentru proiectul de cercetare postdoctorală INFRA-ART: **Medalie de bronz** în cadrul Salonului Internațional de Invenții și Inovații „TRAIAN VUIA” Timișoara, ediția a VI, respectiv **Medalie de argint** în cadrul EUROINVENT 2022 - The 14th Edition of EUROINVENT – European Exhibition of Creativity and Innovation.

PREZENTAREA PRINCIPALELOR REZULTATE OBȚINUTE ȘI A INDICATORILOR DE REZULTAT REALIZAȚI

În cadrul proiectului de cercetare postdoctorală INFRA-ART au fost obținute următoarele rezultate, în acord cu planul de realizare:

- **Website al proiectului.** Pagină web asociată proiectului INFRA-ART disponibilă online în primele 3 luni de la implementare: <http://certo.inoe.ro/infraart/>. Pagina web prezintă obiectivele și planul de implementare al proiectului, un sumar al rezultatelor obținute în cadrul etapelor derulate, respectiv principalii indicatori de diseminare a rezultatelor științifice (articole și prezentări la conferințe). Pentru o vizibilitate cât mai mare, informațiile prezentate în cadrul paginii web sunt în limba engleză.



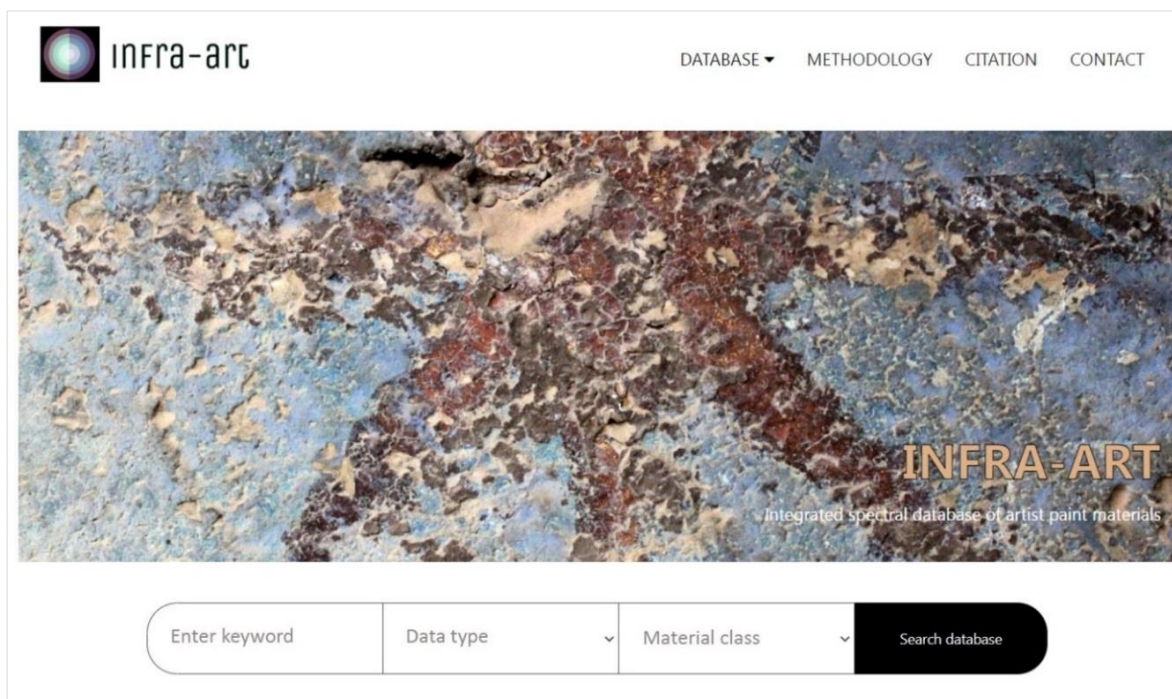
Interfața website a proiectului INFRA-ART

- **Librărie spectrală specializată pe materiale de artă.** Unul dintre principalele rezultate obținute în cadrul proiectului îl reprezintă dezvoltarea, implementarea și optimizarea librăriei spectrale INFRA-ART (**INFRA-ART Open Access Spectral Library**), în primele 12 luni de la demararea proiectului. Baza de date este o resursă *open access*, disponibilă online la adresa: <https://infraart.inoe.ro/>. Librăria spectrală INFRA-ART, specializată pe materiale de artă, include până la acest moment 556 de materiale de referință cărora le sunt asociate 1039 de spectre. Probele de referință acoperă 14 clase de materiale. Fiecărei probe îi sunt asociate o serie de identificatori (Sample ID, Sample type, Sample source, Origin, Description), date descriptive (Alternative names, Chemical information, History of use), cât și metadata (date experimentale privind achiziția spectrelor FTIR, respectiv XRF). Pentru o mai bună funcționalitate și un grad ridicat de acces, în pagina web ce găzduiește librăria spectrală a fost

încorporat un motor de căutare (după cuvinte cheie, tipuri de date sau clase de materiale), precum și un vizualizator interactiv de spectre care permite utilizatorilor să analizeze datele spectrale asociate fiecărei probe. Fereastra interactivă include o serie de funcții ca *zoom*, *pan*, *download plot*, și, poate cel mai important aspect, indicarea valorii peak-urilor (*peak label*) prin simpla poziționare a mouse-ului pe fiecare bandă (peak) în parte.

În vederea diseminării acestei resurse către comunitatea științifică a fost trimis spre publicare în revista *Journal on Computing and Cultural Heritage*, articolul "INFRA-ART: An open access spectral library of art-related materials as a digital support tool for cultural heritage science", autori: I.M. Cortea, A. Chiroșca, L.M. Angheluță, G. Serițan, lucrare aflată la momentul de față în evaluare.

Tot în vederea diseminării și promovării bazei de date INFRA-ART, urmează a fi prezentată sub formă de comunicare lucrarea "A new open access spectral library of art-related materials as a digital support tool for cultural heritage science", în cadrul conferinței internaționale Lasers in the Conservation of Artworks (LACONA XIII), ce va avea loc în perioada 12 –16 Sep 2022 la Florența (comunicare acceptată, participant I.M. Cortea).



Interfața web asociată librăriei spectrale INFRA-ART (la data de 26.07.2022)

- **Studiu tehnic** privind caracterizarea și discriminarea pigmentilor de pământ prin tehnici spectroscopice complementare. În cadrul Activității 2.3. a fost elaborată o metodologie analitică pentru identificarea și discriminarea pigmentilor de pământ de proveniență geologică diferită, având la bază date achiziționate prin tehnici spectroscopice complementare. Mai exact, un set de 30 de pigmenti puri Kremer din 9 regiuni geografice diferite a fost selectat pentru acest studiu. Paleta cromatică a pigmentilor selectați acoperă: ocruți galbene și aurii (11 probe), ocruți roșii (5 probe), pământuri brune și negre (8 probe) și pământuri verzi (6 probe). Majoritatea surselor de proveniență sunt documentate încă din antichitate ca centre geologice importante de exploatare și de producție a pigmentilor: Andaluzia (Spania), Burgundia (Franța), Bavaria (Germania), Toscana (Italia), Midlet (Maroc), etc. Metodologia analitică a inclus tehnici spectroscopice complementare, non- și minim-invazive, de înaltă

specificitate - analiză FTIR, respectiv analiză XRF. Rezultatele obținute au fost ulterior rafinate și complementate de investigații Raman, în vederea publicării unui articol științific, apărut în 2022 în revista *Minerals* (jurnal indexat ISI, zona galbenă – Q2): "Assessment of easily accessible spectroscopic techniques coupled with multivariate analysis for the qualitative characterization and differentiation of earth pigments of various provenance", autori: I.M. Cortea, L. Ghervase, R. Rădvan, G. Serîțan.

- **Algoritm de clasificare** automată a pigmentilor de pământ funcție de proveniență. În urma rezultatelor preliminare obținute în cadrul Activităților 2.4/2.5, modele de clasificare bazate pe analiza în componente principale a seturilor de date FTIR au fost rafinate. Ulterior, modele de clasificare multivariată au fost de asemenea dezvoltate pe baza seturilor de date XRF. Rezultatele obținute au evidențiat o bună clasificare, probele fiind relativ bine grupate funcție de proveniența geologică. Datele obținute au fost incluse în articolul mai sus menționat, apărut în 2022 în revista *Minerals*. Rezultatele studiului demonstrează beneficiile utilizării unei astfel de metodologii, și evidențiază potențialul combinării tehnicilor spectroscopice cu analiza multivariată în rezolvarea unor teme de cercetare complexe, precum studiile de proveniență.

Considerate materiale valoroase în cadrul mai multor culturi antice, pământurile naturale au jucat un rol important în expresia și evoluția culturală a umanității. Pigmenții naturali pe bază de fier sunt adesea identificați în situri arheologice – artă rupestră, diverse artefacte cu policromie (ceramică), pictură murală. Ocrurile, umbrele, pământurile verzi, reprezintă diferite varietăți de pământuri naturale și au fost utilizate ca și componente importante atât în straturile picturale cât și în straturile de preparare ale lucrărilor de artă. Pigmenții de pământ reprezintă și cea mai importantă clasă de pigmenți anorganici utilizată în iconografia bizantină și post-bizantină. Nu în ultimul rând, această clasă de pigmenți se regăsește frecvent și în paleta cromatică a artizanilor romani pentru realizarea picturilor murale. Studiul realizat contribuie la cunoașterea și înțelegerea chimiei complexe a acestor clase de materiale, propunând o abordare ce are la bază tehnici spectroscopice de rutină, ușor accesibile majorității laboratoarelor de cercetare, în conjuncție cu tehnicile chemometrice.

În vederea diseminării rezultatelor obținute, acest studiu a fost prezentat și în cadrul conferinței internaționale inART - 5th International Conference on Innovation in Art Research and Technology, desfășurate la Paris în perioada 28 Iun - 1 Iul 2022: "Characterization and differentiation of earth pigments from various geological sources by means of complementary spectroscopic techniques and principal component analysis", participant I.M. Cortea.

Modele de clasificare pe baza algoritmului PCA au fost de asemenea testate și pe alte clase de materiale, inclusiv probe complexe (atât probe de laborator cât și probe prelevate din straturi picturale asociate unor obiecte de artă cu policromie diversă). Au fost dezvoltate modele PCA pe baza mai multor tipuri de date – XRF, FTIR, date hiperspectrale, cu rezultate mixte din punct de vedere al clusterizării datelor. Rezultate îmbunătățite în ceea ce privește discriminarea și clasificarea amestecurilor complexe de materiale picturale ar putea fi obținute în viitor prin post-procesarea avansată a seturilor de date, respectiv prin testarea unor algoritmi mai avansați de clasificare.

- **Portofoliu studii de caz.** În cadrul proiectului INFRA-ART au fost realizate studii multi-analitice pe o serie de artefacte arheologice și obiecte de artă cu policromie, prin integrarea informațiilor obținute prin tehnici spectrale și imagistice. Studiile au urmărit de o parte caracterizarea și identificarea tehnicii picturale și a materialelor utilizate la realizarea picturii, respectiv identificarea amprentelor chimice și a caracteristicilor tehnice ce pot fi utilizate pentru depistarea falsurilor de artă. Metodologia

propusă în cadrul proiectului INFRA-ART a inclus metode spectroscopice de înaltă sensibilitate, utilizate pe scară largă (FTIR, XRF), precum și tehnici de ultimă generație – imagistica hiperspectrală. Utilizarea de tehnici complementare permite depășirea limitărilor intrinseci ale fiecărei metode în parte, metodologia propusă fiind capabilă să identifice atât componente organice cât și anorganice și să ofere informații imagistice cu privire la distribuția diverselor componente prezente. O investigație aprofundată de acest tip poate oferi perspective și informații inaccesibile în mod obișnuit cu privire la procesul de producție, tehnica și materialele de lucru, modul în care suprafețele pictate se degradează în timp, sau cum utilizarea anacronică a materialelor picturale poate fi asociată fie cu falsuri, fie cu intervenții de restaurare anterioare.

O primă direcție de studiu a vizat investigarea unor **fragmente de pictură murală** din perioada romană (sec. al II-lea), în scopul caracterizării paletelor cromatice și a tehnicii de execuție, respectiv în scopul identificării unor amprente chimice asociate pigmentilor utilizați, informații chimice ce ar putea fi corelate cu proveniența materialelor. Un prim studiu de caz a fost reprezentat de o serie de fragmente ce prezentau urme de policromie, excavate în situl arheologic de la *Alburnus Maior* (Roșia Montană). Fragmentele investigate aparțin colecției Muzeului Național de Istorie a României.

Rezultatele preliminare obținute în urma unui studiu multi-analitic, interdisciplinar, au fost diseminate în cadrul unei prestigioase conferințe internaționale - 11th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (ICAVS 11), desfășurate în contextul pandemiei COVID-19 online, în perioada 26-26 Aug 2021. Lucrarea "Advanced analytical investigation of ancient wall-painting fragments discovered in the Roman Baths from Alburnus Maior", a fost prezentată în cadrul secțiunii *Archeology and Cultural Heritage* (flash presentation, participant I.M. Cortea). Ulterior, în urma rafinării investigațiilor realizate, rezultatele au fost publicate *in extenso* în 2021 în revista *Applied Sciences* (jurnal indexat ISI, zona galbenă – Q2), în cadrul unui număr special dedicat patrimoniului cultural: *Analytical Methodologies Applied to the Study of Cultural Heritage Surface*. Articolul, intitulat "Investigation of ancient wall painting fragments discovered in the Roman Baths from Alburnus Maior by complementary non-destructive techniques", autori: I.M. Cortea, L. Ratoiu, L. Ghervase, O. Țentea, M. Dinu, prezintă de asemenea și primele dovezi ale utilizării unui liant organic în aplicarea straturilor picturale în cazul picturii murale antice excavate pe teritoriul fostei provincii romane Dacia.

Setul de date obținut, coroborat cu date anterioare obținute pe fragmente de pictură murală din aceeași perioadă, au permis de asemenea demararea unui studiu preliminar privind proveniența pigmentilor utilizați în provincia romană Dacia. Acest subiect de cercetare a fost continuat și în 2022, noi fragmente de pictură murală romană provenind de la situl arheologic de la *Sarmizegetusa* fiind investigate, rezultatele preliminare ale acestui nou studiu fiind diseminate în cadrul conferinței internaționale inART (5th International Conference on Innovation in Art Research and Technology) desfășurate la Paris: "New insights into the materials and painting technique of ancient wall paintings from the Roman province of Dacia: an integrated multi-analytical study", participant I.M. Cortea.



O a doua direcție de studiu a vizat investigarea unor **lucrări de artă cu straturi picturale complexe**. Portofoliul de studii de caz a inclus două lucrări din colecția Muzeului Național de Artă al României, 4 lucrări din colecția Muzeului Municipiului București, respectiv 2 lucrări aparținând unei colecții private.

Pachetele de date, obținute anterior proiectului, au fost supuse unor procesări și prelucrări avansate în scopul obținerii unor hărți de distribuție a pigmentilor, respectiv în scopul evidențierii unor detalii privind tehnica de execuție. Rezultatele obținute în urma coroborării pachetelor de date (spectrale și imagistice) au permis o caracterizare detaliată a straturilor picturale atât la nivelul suprafeței cât și în profunzime. Au fost identificate amprente chimice dar și caracteristici tehnice ce pot susține nu doar procesul de conservare/restaurare al acestor obiecte de artă ci și studiile de proveniență sau cele de autentificare (detalii privind tehnica de execuție, paletă cromatică specifică artistului, prezența unor pigmenti anacronici).

În ceea ce privește autentificarea, aceasta poate fi abordată folosind diverse tehnici de investigare, de la metode de datare indirectă, la tehnici de caracterizare a materialelor și sau produșilor de degradare. În cazul tablourilor această sarcină rămâne în continuare dificilă datorită complexității sistemului și necesității de a utiliza cu precădere tehnici de investigare non-invasive care, inevitabil, prezintă limitări specifice. O serie de pigmenti pot fi datați indirect, ținând cont de momentul introducerii acestora în pictură (este cunoscut faptul că o dată cu revoluția industrială o gamă largă de pigmenti de sinteză au fost introduși în pictură). Alte indicii indirecte ce pot ajuta procesul de autentificare îl reprezintă caracteristicile de îmbătrânire cum ar fi prezența unei rețele de cracluri sau prezența unor produși de degradare specifici rezultați în urma proceselor lente de îmbătrânire naturală ce au loc în timp la nivelul straturilor picturale. Nu în ultimul rând, în cazul prezenței pigmentilor minerali naturali, analiza elementelor în urmă poate oferi informații extrem de valoroase asupra provenienței acestora.



În cazul lucrărilor atribuite lui Lucas Cranach cel Bătrân, datele preliminare FTIR/ XRF, au fost suprapuse datelor obținute prin imagistică hiperspectrală în scopul obținerii unor hărți de distribuție spațială a pigmentilor la nivelul suprafeței. Studiul detaliat al unor zone picturale de interes a permis o vedere fără precedent asupra tehnicii de lucru a acestui important maestru de secol XVI. Metodologia propusă a evidențiat importanța tratării și post-procesării datelor în scopul maximizării informațiilor analitice ce pot fi extrase, mai ales în cazul utilizării algoritmilor de clasificare pe seturi complexe de date. Informațiile obținute oferă noi perspective și o mai bună înțelegere asupra materialelor și metodelor de lucru ale artistului, rezultatele acestui studiu avansat urmând a fi prezentate în cadrul conferinței internaționale Lasers in the Conservation of Artworks (LACONA XIII), ce va avea loc în perioada 12 –16 Sep 2022 la Florența (comunicare acceptată "The secrets of old masters: investigating the pigment mixtures and layering techniques in two paintings by Lucas Cranach the Elder and his workshop", participant I.M. Cortea).

În cazul lucrărilor semnate Ștefan Luchian (pasteluri pe carton), rezultatele obținute au permis caracterizarea în detaliu a paletelor cromatice utilizate de acest influent artist, ale cărui opere de artă nu au fost niciodată investigate sistematic până în prezent. Pe lângă informațiile cu privire la materialele picturale folosite, analiza avansată a seturilor de date spectroscopice a permis și obținerea unor informații valoroase sub aspectul tehnicii de execuție, a obținerii tonurilor cromatice sau suprapunerilor cromatice, informații extrem de importante ce pot susține studiile de autentificare. Rezultatele generale obținute se doresc a fi valorificate într-o viitoare publicație.



AIM OF THE STUDY
 The aim of the study is to characterize and differentiate earth pigments from various geological sources by means of complementary spectroscopic techniques and principal component analysis.

RESEARCH HIGHLIGHTS
 The study highlights the use of complementary spectroscopic techniques (FTIR, Raman, XRF, XRD, SEM-EDS) and Principal Component Analysis (PCA) to identify and differentiate earth pigments from various geological sources.

MATERIALS & METHODS
 The study used various earth pigments (red, yellow, black, white) from different geological sources. The samples were analyzed using FTIR, Raman, XRF, XRD, and SEM-EDS. The data was processed using PCA to identify the principal components that differentiate the pigments.

CONCLUSIONS
 The study concludes that complementary spectroscopic techniques and PCA are effective methods for characterizing and differentiating earth pigments from various geological sources.



ARCHAEOLOGICAL CONTEXT
 The study provides an archaeological context for the wall paintings, discussing their location and the historical background of the Roman province of Dacia.

METHODOLOGY
 The study employed an integrated multi-analytical approach, combining archaeology, art history, and scientific analysis (FTIR, Raman, XRF, XRD, SEM-EDS) to study the materials and painting techniques.

RESULTS AND DISCUSSION
 The study presents the results of the analyses, discussing the materials used, the painting techniques, and the implications for the understanding of ancient wall paintings in Dacia.

CONCLUSIONS
 The study concludes that the integrated multi-analytical approach provides new insights into the materials and painting techniques of ancient wall paintings from the Roman province of Dacia.

Comunicări tip poster susținute în cadrul conferinței internaționale inART 2022 organizată la Paris

Pe lângă rezultatele mai sus menționate au fost obținute și două distincții în urma prezentării proiectului de cercetare postdoctorală INFRA-ART în cadrul unor saloane și târguri internaționale de invenție. Mai exact, o **Medalie de bronz** în cadrul Salonului Internațional de Invenții și Inovații „TRAIAN VUIA” ediția a VI – a, organizat în perioada 13-15 Oct 2020 la Timișoara, respectiv o **Medalie de argint** în cadrul EUROINVENT 2022 - *The 14th Edition of EUROINVENT – European Exhibition of Creativity and Innovation*, organizat în perioada 26-28 Mai 2022 la Iași. Premiile obținute evidențiază caracterul inovativ al metodologiei de cercetare pe care proiectul INFRA-ART o propune, ce integrează tehnici spectroscopice complementare, cu analiza imagistică de ultimă generație, respectiv cu tehnici de analiză multivariată, în investigarea operelor de artă cu policromie.



Premii acordate proiectului de cercetare postdoctorală INFRA-ART

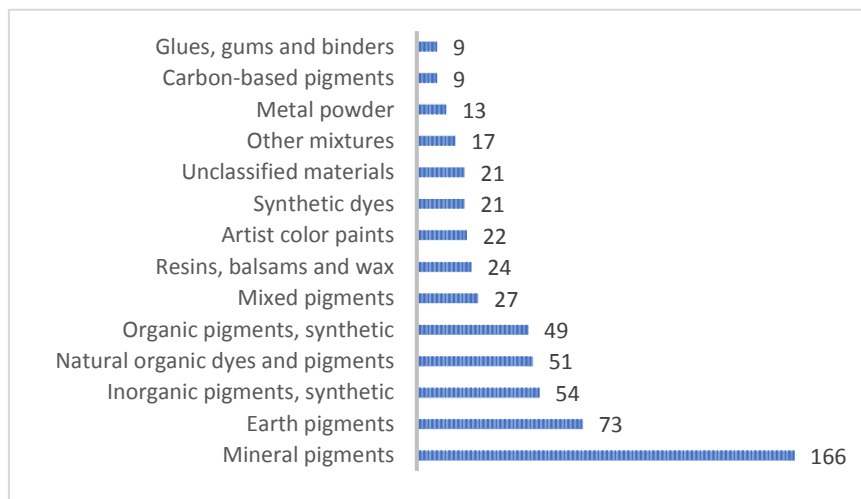
PRINCIPALII INDICATORI DE REZULTAT INCLUD:

- ✓ **Produs informatic:** INFRA-ART Open Access Spectral Library - <https://infraart.inoe.ro/>
- ✓ **Articole ISI (x3)**
 - I.M. Corcea, L. Ratoiu, L. Ghervase, O. Țentea, M. Dinu (2021). Investigation of ancient wall painting fragments discovered in the Roman baths from Alburnus Maior by complementary non-destructive techniques, in *Applied Sciences*, 11, 10049. <https://doi.org/10.3390/app112110049> [Journal Impact Factor: 2.838, Journal Rank: JCR – Q2 Physics, Applied]
 - I.M. Corcea, L. Ghervase, R. Rădvan, G. Serîțan (2022). Assessment of easily accessible spectroscopic techniques coupled with multivariate analysis for the qualitative characterization and differentiation of earth pigments of various provenance, in *Minerals*, 12(6), 755. <https://doi.org/10.3390/min12060755> [Journal Impact Factor: 2.818, Journal Rank: JCR – Q2 Mineralogy]
 - I.M. Corcea, A. Chiroșca, L.M. Angheluță, G. Serîțan (2022). INFRA-ART: An open access spectral library of art-related materials as a digital support tool for cultural heritage science, in *Journal on Computing and Cultural Heritage – under review* [Journal Impact Factor: 2.047, Arts & Humanities Citation Index]
- ✓ **Comunicări în cadrul unor conferințe internaționale (x3)**
 - I.M. Corcea, Advanced analytical investigation of ancient wall-painting fragments discovered in the Roman Baths from Alburnus Maior. 11th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (ICAVS 11), 23-26 Aug 2021, online.
 - I.M. Corcea, Characterization and differentiation of earth pigments from various geological sources by means of complementary spectroscopic techniques and principal component analysis. 5th International Conference on Innovation in Art Research and Technology (inART 2022), 28 Iun-1 Iul 2022, Paris, Franța.
 - I.M. Corcea, New insights into the materials and painting technique of ancient wall paintings from the Roman province of Dacia: an integrated multi-analytical study. 5th International Conference on Innovation in Art Research and Technology (inART 2022), 28 Iun-1 Iul 2022, Paris, Franța.
- ✓ **Participări în cadrul unor târguri de invenție**
 - Prezentarea proiectului de cercetare postdoctorală INFRA-ART în cadrul Salonului Internațional de Invenții și Inovații „TRAIAN VUJIA” Timișoara, ediția a VI – a, 13-15 Oct 2020. – *proiect premiat cu Medalie de bronz*
 - Prezentarea proiectului de cercetare postdoctorală INFRA-ART în cadrul EUROINVENT 2022 - *The 14th Edition of EUROINVENT – European Exhibition of Creativity and Innovation*, organizat în perioada 26-28 Mai 2022 la Iași. – *proiect premiat cu Medalie de argint*
- ✓ **Articole în presă**
 - I.M. Corcea, Data mining și analiza multivariată în heritage science: noi metode emergente pentru investigarea bunurilor de artă și patrimoniu, *Market Watch*, nr. 245, 2022, pp. 34-35.

IMPACTUL ESTIMAT AL REZULTATELOR OBTINUTE

Rezultatul cel mai semnificativ obținut în cadrul proiectului de cercetare postdoctorală îl reprezintă dezvoltarea bazei de date **INFRA-ART Open Access Spectral Library**, ce integrează până la acest moment peste 1000 de spectre ATR-FTIR, XRF, respectiv un set preliminar de date Raman, asociate la peste 500 de materiale de referință. Librăria spectrală este dedicată exclusiv materialelor de artă fiind o resursă *open access*, disponibilă online - <https://infraart.inoe.ro/>, ce vine în sprijinul specialiștilor din domeniu ce operează cu tehnicile spectroscopice mai sus menționate. Alegerea tehnicilor de caracterizare nu este întâmplătoare, datele spectrale incluse în librărie fiind de maxim interes în cadrul comunității științifice din domeniu. Toate tehnicile utilizate (XRF, ATR-FTIR, Raman) sunt non-distructive, fiind utilizate pe scară largă în examinarea tehnică a operelor de artă, atât în laborator cât și *in-situ*. Aceste tehnici permit identificări chimice specifice, aspect extrem de important atunci când avem de-a face cu amestecuri complexe și eterogene de compuși organici și anorganici – precum straturile picturale sau probele arheologice. Librăria spectrală INFRA-ART a fost concepută ca un instrument digital pentru cercetători și specialiști din domeniul științei patrimoniului, istoriei artei, conservării și restaurării, și se dorește a fi o resursă *open access* ce sprijină nu doar procesul de analiză spectrală ci, prin multitudinea de date încorporate, și studiile axate pe *data mining* ce au ca obiective clasificarea, clusterizare (*clustering*) sau descoperirea de *pattern*-uri.

Destul de frecvent, în procesul de caracterizare și identificare a materialelor este nevoie de date de referință. În acest sens, dezvoltarea unor baze de date de înaltă rezoluție ale numeroaselor substanțe pure utilizate ca materiale de artă de-a lungul timpului este de maximă importanță pentru caracterizarea probelor necunoscute. Librăria spectrală INFRA-ART furnizează nu doar date spectrale de înaltă rezoluție dar și informații detaliate asupra fiecărei probe de referință. Comparativ cu alte baze de date, librăria spectrală INFRA-ART, este specializată doar pe materiale de artă, acoperind o clasă largă de materiale, inclusiv materiale ce nu se regăsesc în alte baze de date ca spre exemplu: un număr impresionant de pigmenți de pământ de proveniență diversă, pigmenți cu efecte speciale (pigmenți sidefați, pigmenți fluorescenți/fosforescenți), pigmenți utilizați în pictura japoneză tradițională (*iwa-enogu*), etc. Un alt punct forte este dat de faptul că librăria spectrală INFRA-ART include date furnizate de tehnici spectroscopice complementare (XRF, FTIR, Raman) oferind astfel informații atât la nivel elementar, cât și molecular. La acest moment, probele de referință acoperă 14 clase de materiale: pigmenți minerali, pigmenți de pământ, pigmenți anorganici de sinteză, pigmenți organici de sinteză, pigmenți și coloranți organici naturali, amestecuri de pigmenți, etc.



Distribuția probelor existente în baza de date INFRA-ART funcție de clasa de materiale (la data de la data de 26.07.2022)

Baza de date a fost dezvoltată conform standardelor și tehnologiilor de ultimă generație, fiind axată în principal pe aspecte de scalabilitate și securitate a datelor, iar arhitectura aplicației (*bottom-up architecture*) este suficient de flexibilă pentru a asigura în viitor integrarea altor tipuri de date spectrale. Conform planului de realizare, baza de date a fost dezvoltată și implementată în perioada 2020-2021. Cu toate acestea, atât popularea bazei de date cât și optimizarea acesteia au continuat și după finalizarea activităților asociate din proiect. În 2022 am continuat achiziția datelor pe materiale de referință și am extins din punct de vedere analitic librăria spectrală cu date Raman. Atât interfața grafică cât și aspecte ce țin de uzabilitate, accesibilitate, funcționalitate și viteză au fost optimizate pentru o experiență îmbunătățită a utilizatorilor externi. De asemenea, după cum am menționat anterior, am derulat o serie de activități în vederea diseminării acestei noi resurse digitale către publicul de specialitate: articol științific în curs de publicare (*Journal on Computing and Cultural Heritage*), comunicare acceptată spre prezentare în cadrul unei conferințe internaționale (LACONA XIII), articol în presa scrisă pentru popularizarea științei (revista Market Watch).

The screenshot displays the INFRa-ART database interface. At the top, there is a navigation menu with 'DATABASE', 'METHODOLOGY', 'CITATION', and 'CONTACT'. Below the header is a large image of a textured surface. The main content area is titled 'Caledonian Brown' and contains a table with the following data:

Sample ID: PK40623	Origin: Mineral; Provenance: Morocco	Chemical Information: Natural earth color
Sample Type: Reference material	Description: Powder sample (0-120 μ)	History of use: Since antiquity
Sample Source: Kremer Pigments	Alternative names: CI Pigment Brown 8; Manganese brown; Cappagh brown	Material Class: Earth pigments
Acquisition Conditions: Current intensity: 10.60 μA Tube voltage: 40 kV Analysis time: 300 s No filtering, air atmosphere		

Below the table, there are three tabs for different spectra: 'Raman Spectrum' (WP 785 ER Raman Spectrometer), 'XRF Spectrum' (Bruker Tracer III-SD handheld XRF), and 'FTIR Spectrum' (Purkin Elmer Spectrum Two FTIR Spectrometer). The 'XRF Spectrum' tab is selected, showing a plot titled 'Caledonian Brown - XRF Spectrum'. The y-axis is 'Net Count Rate' (0 to 3.5M) and the x-axis is 'Energy [keV]' (0 to 40). A prominent peak is visible at approximately 5.9 keV.

Exemplificare fișă probă în cadrul librăriei spectrale INFRA-ART (la data de 27.07.2022)

Baza de date va fi încărcată în regim continuu (actualizări periodice), pe măsură ce noi materiale de referință vor fi disponibile pentru analiză. Sub aspectul direcțiilor de dezvoltare viitoare, intenționăm să integrăm un număr mai mare de spectre Raman în baza de date și să dezvoltăm un instrument analitic care va permite utilizatorilor externi să efectueze o căutare în biblioteca spectrală după *peak-uri* caracteristice.

Baza de date INFRA-ART este un **produc tehnologic**, o librărie spectrală integrată specializată pe materiale de artă, ce vine în sprijinul specialiștilor din domeniu. Estimăm un **impact semnificativ al acestui produs la nivelul comunității științifice internaționale**, necesitatea unor baze de date spectrale fiind de maxim interes în rândul specialiștilor ce operează cu tehnici analitice similare. **În vederea creșterii impactului**, baza de date va fi promovată prin publicarea de articole științifice (manuscris aflat la momentul raportării în evaluare), prin participarea în cadrul unor conferințe internaționale (comunicare acceptată), respectiv prin diferite canale de comunicare media clasice și digitale. Estimăm un **grad ridicat de accesare al librăriei spectrale de către utilizatorii externi** odată cu apariția publicației științifice aferente, respectiv, **posibilități de colaborare viitoare**.

Impactul tehnologic / științific al bazei de date INFRA-ART este dovedit de **interesul manifestat de colaboratori externi**, la acest moment existând deja cereri de colaborare din partea Institutului Național Italian pentru Fizică Nucleară (INFN-CHNet - Cultural Heritage Network) în vederea utilizării pachetelor de date spectrale existente pentru dezvoltarea unor algoritmi de clasificare utilizând rețele neurale (*neural networks*).

Rezultatele științifice generale obținute în cadrul proiectului INFRA-ART **pe tema fragmentelor de pictură murală romană** au deschis **noi teme și direcții de cercetare aplicativă**, o propunere de proiect fiind depusă în 2021 în cadrul competiției PNCDI III - Programme 2 - Subprogramme 2.1 – Competitivitate prin cercetare, dezvoltare și inovare – Proiect experimental – demonstrativ. **Proiectul propus**, "Metodologie analitică inovatoare pentru identificarea in-situ și maparea în timp real a lianților organici utilizați în pictura murală antică" (**PN-III-P2-2.1-PED-2021-3576**, director de proiect I.M. Cortea), a fost **acceptat spre finanțare în 2022**.

Modelele de analiză multivariată (analiză în componente principale - PCA a seturilor de date FTIR și XRF înregistrate pe grupul de pigmenți de pământ) au generat rezultate satisfăcătoare în ceea ce privește clasificarea și discriminarea pigmentilor funcție de sursa geologică din care provin, evidențiind un **instrument promițător pentru studii de proveniență**. În cazul datelor FTIR a fost propus un model de clasificare al pigmentilor de pământ funcție de natura grupărilor cromoforice prezente, o abordare nouă ce nu a mai fost propusă în alte studii de specialitate publicate până la acest moment.

Hărțile de distribuție spațială a pigmentilor obținute prin coroborarea datelor spectrale în mai multe puncte cu tehnicile de mapare oferite de imagistica hiperspectrală oferă **noi perspective și posibilități de studiu analitic**, lărgind astfel **paleta de servicii** pe care grupul CERTO le poate oferi beneficiarilor interesați de **pachete analitice complexe**. Abordarea integrativă propusă reprezintă o soluție rapidă și relativ ieftină pentru examinarea unor suprafețe picturale mari, ce poate fi suplimentar rafinată în scopul dezvoltării de noi metodologii analitice pentru caracterizarea și diagnosticarea operelor de artă.

Impactul la nivel academic s-a concretizat prin participarea la 2 conferințe internaționale de prestigiu, respectiv prin publicarea a 2 articole ISI în reviste de top (zona galbenă, Q2), în perioada de implementare a proiectului. În vederea creșterii accesibilității și vizibilității rezultatelor științifice, articolele au fost publicate în reviste *open access*, până la acest moment ambele lucrări având sute de accesări. Comunicările susținute în cadrul conferințelor internaționale au valorificat bogatul material de cercetare obținut și au facilitat posibilitatea generării de noi contacte cu mediile academice.

HERITAGE SCIENCE
CERCETARE & ÎNVĂȚĂMÂNT SUPERIOR

Data mining și analiza multivariată în heritage science: noi metode emergente pentru investigarea bunurilor de artă și patrimoniu

În acest moment, într-o mare varietate de domenii, datele sunt colectate într-un ritm extrem de rapid, fără precedent. Volumul mare de date acumulate impune utilizarea unor metode și tehnici analitice capabile să extragă informații - cum ar fi tipare ascunde sau corelații între date, respectiv să exploreze legăturile dintre acestea în scopul descoperirii de noi cunoștințe (*knowledge discovery*). În ultimii ani, concepte ca *data mining*, *big data analytics*, *pattern recognition* sau *multivariate analysis* au început să fie din ce în ce mai frecvent utilizate în domeniul științei patrimoniului. Aceste noi metode analitice aduc o serie de avantaje întrucât permit analiza unor pachete mari de date, adesea caracterizate de un număr ridicat de variabile, și evidențiază anumite modele, tendințe și relații ascunde în seturi multivariate de date.

Dr. fiz. Ioana Maria Cortea, INOE 2000

Stadiul actual în domeniu

Investigarea bunurilor de artă și patrimoniului prin tehnici analitice complementare a devenit o procedură de rutină în domeniul științei patrimoniului. Caracterizarea și identificarea materialelor constituente ale diverselor tipuri de artefacte poate contribui la înțelegerea istoriei obiectului, poate oferi informații valoroase asupra tehnicii de execuție și în unele cazuri asupra provenienței și/sau autenticității acestuia, respectiv poate sprijini procesul de restaurare prin luarea unor decizii informate. La momentul de față, gama de tehnici analitice disponibile pentru investigația materialelor asociate bunurilor de artă și patrimoniului este relativ extinsă, de la metode spectroscopice consacrate (spectroscopie în infraroșu cu transformată Fourier - FTIR, Raman, fluorescență de raze X - XRF), la tehnici avansate ca spectroscopia laser, tehnicile cromatografice sau tehnicile de cartografiere chimică (microXRF).

De cele mai multe ori, pentru a identifica exact și combinașe de tehnici analitice specifice este necesară. Utilizarea unor tehnici de screening-ul unui număr mare de zone de interes, urmând să utilizeze unul sau mai multe tehnici de caracterizare avansate, pe probe specifice cu potențialul maxim de soluționare a problemei analitice de studiu, reprezintă o metodologie setim de frecvent abordată. Direcțiile actuale în domeniu includ dezvoltarea de echipamente

HERITAGE SCIENCE
CERCETARE & ÎNVĂȚĂMÂNT SUPERIOR



Figura 2. Interfața web asociată librăriei spectrale INFRART

tip PCA permite reducerea complexității datelor și implicit reducerea numărului de variabile, permite evidențierea și stabilirea corelațiilor dintre variabile, respectiv permite determinarea variabilelor latente ce se află în spațiul variabilelor măsurate.

În cadrul INOE 2000, studiul de cercetare orientat asupra discriminării unor vopsele pe bază de lanțuri sintetice au evidențiat în urma analizei statistice multivariabile o creștere a sensibilității de detecție a componentelor minore prezente, ceea ce a permis diferențierea între probe cu semnătură spectrală extrem de similară. Utilizarea analizei PCA pe seturi mari de date FTIR asociate unor straturi picturale îmbibărite artificial a evidențiat prezența unor interacții specifice liant-pigment, permind astfel să înțelegem și să anticipăm mai bine mecanismele de degradare asociate acestor tipuri de structuri. Capacitatea de discriminare și clasificare a materialelor pentru care comparația și analiza vizuală directă a regiunii spectrale de fingerprint nu este suficientă a fost de asemenea testată. Astfel, prin asocierea pachetelor de date spectrale cu analiza chimometrică a fost posibilă diferențierea și clasificarea unor pigmenți minerali și de pământ (cu structură chimică similară) din diverse surse geologice, evidențind într-un instrument analitic promițător pentru studiul de proveniență.

Proiectul INFRART

Proiectul postdoctoral INFRART (Spectral data mining for material identification, chemical fingerprinting and forgery detection of painted works of art, PN-III-P1-1-PD-2019-1099), valorifică infrastructura de excelență din cadrul INOE 2000 propunând o abordare experimentală multianuală care integrează tehnici spectroscopice complementare, cu analiza imagistică de ultimă generație, respectiv cu tehnici de analiză multivariată, în investigația operelor de artă cu polimerice. Implementat începând cu septembrie 2018, proiectul INFRART a urmărit mai multe obiective specifice: (1) integrarea informațiilor obținute prin tehnici complementare în vederea unei caracterizări detaliate a materialelor picturale; (2) identificarea amprentelor chimice și/sau caracteristicilor tehnice ce pot fi utilizate pentru depistarea falsurilor de artă; (3) exploatarea datelor spectrale prin tehnici chimometrice în vederea dezvoltării unui algoritmul de clasificare automată a materialelor picturale; respectiv, (4) îmbunătățirea paletelor de servicii prin dezvoltarea de noi pachete analitice dedicate pieței de artă.

Datorită structurii lor unice și complexe, investigația straturilor picturale reprezintă o provocare constantă. Operele de artă cu polimerice sunt caracterizate printr-un grad ridicat de eterogenitate dat de multibundness de componente ce pot fi prezente în diversele straturi aplicate succesiv. Fiecare strat pictural este un amestec de diferiți compuși (pigmenți) coloranți naturali sau organici, lianți, filler minerali) care interacționează și se modifică în timp. Nu în ultimul rând, ținând cont de necesitatea păstrării integrității obiectului, probele prelevate dintr-o operă de artă sunt limitate ca număr, fiind așadar recomandată utilizarea tehnicilor non-sau minim-invasive.

În principiu, o mare varietate de informații pot fi obținute prin integrarea diferitelor tehnici analitice, singurele limitări fiind disponibilitatea și costul. Metodologia propusă în cadrul proiectului INFRART include metode spectroscopice de înaltă sensibilitate, utilizate pe scară largă (FTIR, XRF), precum și tehnici de ultimă generație - imagistica hiperspectrală. Con-

point de vedere istoric, tehnicile chemometrice își au originile în anul 1960, însă termenul „chemometrie” este utilizat pentru întâia oară abia în 1971 de chimiștii de origine suedeză Svante Wold. Generic, chemometria implică aplicarea metodelor statistice multivariate în scopul de a rafina procesul de măsurare și de a extrage informații cât mai utile și mai complete din datele brute ale măsurătorilor fizico-chimice. Potențialul tehnicilor chemometrice este dat de caracterul intrinsec multivariat al datelor experimentale. Spre exemplu, în cazul datelor FTIR, spectrele constau adesea în funcție de regiunea IR de studiu și rezoluție) în peste 3000 de variabile, întrucât fiecare lungime de undă reprezintă o variabilă independentă. Tehnici de analiză multivariată, ca analiza în componente principale (Principal Component Analysis) sau analiza de cluster (Cluster Analysis), se numără printre metodele utilizate frecvent în rafinarea datelor spectrale.

Metodele chemometrice de analiză exploratorie, au început să fie utilizate cu succes în ultimii ani inclusiv în domeniul științei patrimoniului. Aceste metode de analiză exploratorie prezintă o serie de avantaje întrucât permit gestionarea unor volume mari de date și implicit, în urma extragerii unor informații precise, o mai bună înțelegere a caracteristicilor materialelor studiate. Spre exemplu, analiza de

Figura 1. (a) Detaliu din cadrul unei lucrări de sec. XVII (pictură în ulei pe panou de lemn); (b) hartă a distribuției spațiale a pigmentilor la nivelul suprafeței picturii obținută prin coroborarea datelor spectroscopice FTIR/XRF obținute în mai multe puncte cu imagistica hiperspectrală (algoritm de clasificare SAM - Spectral Angle Mapping).

borarea datelor spectrale în mai multe puncte cu tehnici de mapare oferite de imagistica hiperspectrală, oferă selectivitate ridicată în identificarea și cartografierea materialelor. Utilizarea de tehnici complementare permite depășirea limitărilor intrinseci ale fiecărei metode în parte, metodologia propusă fiind capabilă să identifice atât componente organice cât și anorganice și să ofere informații strategice cu privire la distribuția diverselor componente prezente. O investigație aprofundată de acest tip poate oferi perspective și informații inaccesibile în mod obișnuit cu privire la procesul de producție tehnica și materialele de lucru, modul în care suprafețele pictate se degradează în timp, sau cum utilizarea ananonică a materialelor picturale poate fi asociată fie cu falsuri, fie cu intervenții de restaurare anterioare.

Baze de date și data mining

Destul de frecvent, în procesul de caracterizare și identificare a materialelor este nevoie de date de date de înaltă calitate ale numeroaselor substanțe pure utilizate ca materiale de artă de-a lungul timpului este de maximă importanță pentru identificarea probelor recunoscute. Un produs direct al proiectului INFRART îl reprezintă dezvoltarea unei librării spectrale ce integrează până la acest moment peste 1000 de spectre ATR-FTIR, XRF, respectiv un set preliminar de date Raman, asociate la peste 500 de materiale de referință. Librăria spectrală este dedicată exclusiv materialelor de artă fiind o resursă *open access*, disponibilă online - <https://infrart.inoe.ro/>, ce vine în sprijinul specialiștilor din domeniu ce operează cu tehnici spectroscopice mai sau menținute. Toate tehnicile utilizate sunt non-destructive, fiind folosite pe scară largă în examinarea tehnică a operelor de artă, atât în laborator cât și *in situ*, întrucât permit identificarea chimică specifică, aspect extrem de important atunci când avem de-a face cu amestecuri complexe și eterogene de compuși organici și anorganici - precum straturile picturale sau probele arheologice. Librăria spectrală INFRART a fost concepută ca un instrument digital pentru cercetătorii și specialiștii din domeniul științei patrimoniului, istoriei artei, conservării și restaurării, și se dorește a fi o resursă *open access* ce sprijină nu doar procesul de analiză spectrală ci, prin multitudinea de date încorporate, și studiile axate pe *data mining* ce au ca obiective clasificarea, detecția de variații/anomalii, clusterizarea (clustering) sau descoperirea de modele-uri.

Articol publicat în revista Market Watch ce prezintă principalele direcții de cercetare ale proiectului INFRART

Nu în ultimul rând, în numărul din iunie al revistei Market Watch, în cadrul secțiunii *Heritage Science*, a fost publicat articolul "Data mining și analiza multivariată în heritage science: noi metode emergente pentru investigarea bunurilor de artă și patrimoniu", autor **I.M. Cortea**, ce prezintă o scurtă trecere în revistă a principalelor direcții inovative pe care proiectul INFRART le propune, dar și a principalelor rezultate obținute, accentul fiind pus pe librăria spectrală INFRART, în vederea promovării acesteia către publicul larg. Estimăm în viitor o creștere a impactului științific întrucât o parte din rezultatele obținute în cadrul proiectului INFRART urmează a fi diseminate și după finalizarea perioadei de implementare a proiectului.

Director proiect,
Cortea Ioana Maria

Pagină 12 din 12