

Attualità

MEETING TELEMATICO “CHEMOMETRICS OPEN DAY - LA CHEMIOMETRIA OGGI: UN CONFRONTO APERTO”

Davide Ballabio¹, Rosalba Calvini², Federico Marini³, Paolo Oliveri^{4,}, Giorgia Sciotto⁵*

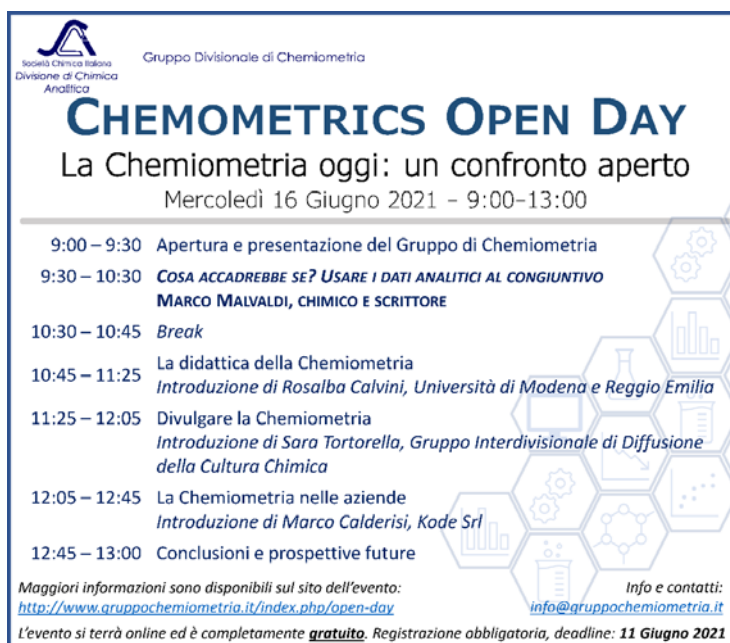
¹Università di Milano Bicocca, ²Università di Modena e Reggio Emilia, ³Università di Roma La Sapienza, ⁴Università di Genova, ⁵Università di Bologna
oliveri@difar.unige.it

Il gruppo divisionale di Chemiometria della Divisione di Chimica Analitica ha organizzato il meeting telematico Chemometrics Open Day - La Chemiometria oggi: un confronto aperto in occasione del ventesimo anniversario della sua costituzione. Dopo una conferenza introduttiva del chimico e scrittore Marco Malvaldi, si sono tenute tre sessioni di discussione su: didattica della chemiometria, divulgazione della chemiometria e il ruolo della chemiometria nell'industria.

Chemometrics Open Day

The divisional group of Chemometrics of the Division of Analytical Chemistry organised the online meeting *Chemometrics Open Day - La Chemiometria Oggi: un confronto aperto* to celebrate the twenty-year anniversary of its constitution. After an introductory lecture by the chemist and writer Marco Malvaldi, three discussion sessions were held, on: teaching chemometrics, spreading chemometrics, and the role of chemometrics in industry.

Nel ventesimo anniversario dalla sua costituzione (2001-2021), il gruppo di lavoro divisionale di Chemiometria, della Divisione di Chimica Analitica della Società Chimica Italiana, ha organizzato un evento telematico a partecipazione gratuita dal titolo *Chemometrics Open Day - La Chemiometria oggi: un confronto aperto*, tenutosi su piattaforma Cisco Webex nella mattina di mercoledì 16 giugno 2021. L'evento ha visto una notevole partecipazione: 280 iscritti provenienti dall'accademia, da enti di ricerca e da svariate realtà



The poster features a blue and white color scheme with a hexagonal pattern on the right side. It includes the logo of the Società Chimica Italiana and the Gruppo Divisionale di Chemiometria. The main title is 'CHEMOMETRICS OPEN DAY' in large blue letters, followed by the subtitle 'La Chemiometria oggi: un confronto aperto'. The date and time are 'Mercoledì 16 Giugno 2021 - 9:00-13:00'. A detailed schedule follows, listing topics and speakers for each time slot. Contact information and a registration deadline are provided at the bottom.

Gruppo Divisionale di Chemiometria

CHEMOMETRICS OPEN DAY

La Chemiometria oggi: un confronto aperto

Mercoledì 16 Giugno 2021 - 9:00-13:00

9:00 – 9:30	Apertura e presentazione del Gruppo di Chemiometria
9:30 – 10:30	COSA ACCADREBBE SE? USARE I DATI ANALITICI AL CONGIUNTIVO MARCO MALVALDI, CHIMICO E SCRITTORE
10:30 – 10:45	Break
10:45 – 11:25	La didattica della Chemiometria <i>Introduzione di Rosalba Calvini, Università di Modena e Reggio Emilia</i>
11:25 – 12:05	Divulgare la Chemiometria <i>Introduzione di Sara Tortorella, Gruppo Interdivisionale di Diffusione della Cultura Chimica</i>
12:05 – 12:45	La Chemiometria nelle aziende <i>Introduzione di Marco Calderisi, Kode Srl</i>
12:45 – 13:00	Conclusioni e prospettive future

Maggiori informazioni sono disponibili sul sito dell'evento:
<http://www.gruppochemiometria.it/index.php/open-day>

Info e contatti:
info@gruppochemiometria.it

L'evento si terrà online ed è completamente **gratuito**. Registrazione obbligatoria, deadline: **11 Giugno 2021**

industriali e di consulenza. Accanto ad una maggioranza di partecipanti italiani, in linea con un evento di portata nazionale, in lingua italiana, non sono mancati i collegamenti dall'estero: Francia, Paesi Bassi, Danimarca, Scozia, Finlandia, India, Stati Uniti ed Ecuador.

Il *Chemometrics Open Day* si è rivelato non solo un momento di riflessione, per fare il punto sulle attività svolte dal gruppo divisionale di Chemiometria in questi primi vent'anni di attività, ma anche una proficua occasione di incontro e confronto su tematiche di grande attualità un ambito chemiometrico.

Ha aperto i lavori l'intervento del Dott. Paolo Oliveri (Università di Genova), attuale coordinatore del gruppo, che ne ha presentato le principali attività scientifiche e di divulgazione, ricordando che tutti gli aggiornamenti sono sempre disponibili sia sul sito internet ufficiale (<https://www.gruppochemiometria.it/>) sia sulla pagina Facebook del gruppo (<https://www.facebook.com/gruppochemiometria/>). Esiste, inoltre, una mailing list alla quale ci si può iscrivere liberamente, inviandone richiesta scritta al coordinatore via e-mail (oliveri@difar.unige.it), per ricevere non solo tutte le notizie relative agli eventi organizzati dal gruppo (un workshop nazionale a cadenza biennale, seminari tematici, scuole...) ma anche annunci di offerte di lavoro in ambito chemiometrico e di bandi per borse di studio.

Con la coinvolgente conferenza introduttiva "*Cosa accadrebbe se? Usare i dati analitici al congiuntivo*", il chimico e scrittore Marco Malvaldi ha stimolato l'interesse e il dibattito tra i partecipanti illustrando alcune strategie per lo studio dei nessi di causalità nell'analisi dei dati, rimarcando il ben noto divario tra la presenza di semplici strutture di correlazione e l'esistenza di rapporti causa-effetto.

Sono seguite tre interessanti sessioni tematiche di discussione e confronto aperto, molto partecipate e coordinate rispettivamente da membri della giunta del gruppo divisionale di Chemiometria.

La prima sessione, dedicata alla didattica, è stata aperta dall'intervento della Dott.ssa Rosalba Calvini (Università di Modena e Reggio Emilia) che ha riportato i risultati del censimento degli insegnamenti universitari in ambito chemiometrico. Tale censimento è stato promosso dalla Giunta del Gruppo di Chemiometria a partire da novembre 2020, al fine di costruire una panoramica complessiva ed il più possibile completa sugli insegnamenti di chemiometria nei diversi Atenei italiani.

Il censimento ha permesso di identificare 39 insegnamenti attivi che trattano di chemiometria, distribuiti in 26 atenei italiani. La maggior parte di questi insegnamenti viene erogata all'interno di Corsi di Laurea Magistrale, sia come corsi obbligatori sia come corsi opzionali.

L'ambito prevalente dei Corsi di Laurea in cui sono presenti insegnamenti di chemiometria è relativo alle scienze chimiche. Tuttavia, negli ultimi anni questa disciplina si è ampiamente diffusa anche in altri ambiti di ricerca, facendo nascere l'esigenza di corsi specifici anche in corsi di laurea diversi, quali: corsi di laurea in tecnologie alimentari, scienze ambientali, farmacia, beni culturali e biotecnologie.

D'altro canto, la didattica della chemiometria non si esaurisce nei corsi di laurea ma è tutt'oggi diffusamente presente anche in corsi di dottorato, i quali saranno oggetto di un prossimo censimento promosso dalla Giunta del Gruppo di Chemiometria, data la loro importanza cruciale per la preparazione dei nuovi ricercatori in ambiti sia pubblici sia privati, dove un'adeguata formazione in ambito chemiometrico è sempre più richiesta.

In accordo con questo aspetto, è doveroso citare le Scuole dedicate alla chemiometria ed coordinate da alcuni Soci del Gruppo, tra cui la *Scuola di Chemiometria di Genova*, organizzata annualmente dal gruppo di ricerca in Chimica Analitica e Chemiometria del Dipartimento di Farmacia dell'Università di Genova, la *Scuola di Metodi Chemiometrici per il Monitoraggio di Processo* organizzata dalla Prof.ssa Marina Cocchi dell'Università di Modena e Reggio Emilia, la *Scuola di Chemiometria applicata ai Beni Culturali* organizzata in prima edizione a febbraio 2020

dalla Dott.ssa Giorgia Sciotto dell'Università di Bologna e le scuole organizzate in collaborazione con la Società Italiana di Spettroscopia NIR (SISNIR).

Dopo l'intervento introduttivo, è seguita un'ampia discussione dei partecipanti su tematiche inerenti alla didattica, moderata dalla Dott.ssa Giorgia Sciotto.

Dalla discussione è emersa chiaramente la necessità di ampliare ulteriormente l'offerta didattica di insegnamenti relativi alla chemiometria negli Atenei italiani, per far fronte alla sempre maggiore richiesta, congiuntamente alla crescente richiesta di persone adeguatamente formate sulle metodiche di analisi multivariata dei dati.

Inoltre, aspetto cruciale relativo alla didattica della chemiometria è risultata la necessità di adattare le metodologie didattiche della chemiometria in base ai diversi corsi di laurea in cui l'insegnamento viene svolto, tenendo in considerazione sia le conoscenze pregresse degli studenti sia le possibili applicazioni. Su questo tema, sono nati interessanti spunti di riflessione ed è inoltre emersa la possibilità di creare una piattaforma condivisa di dataset utilizzabili a scopo didattico che coprano casi di studio relativi ad applicazioni in diversi ambiti.

La seconda delle sessioni di discussione del *Chemometrics Open Day*, moderata dal Prof. Federico Marini (Università di Roma La Sapienza), è stata dedicata alla divulgazione della chemiometria ed è stata introdotta dalla presentazione di Sara Tortorella la quale, oltre ad essere Field Application Scientist di Molecular Horizon, società che si occupa dello sviluppo di soluzioni software per la chimica, la chimica farmaceutica e le biotecnologie e di consulenza nei settori della chemiometria, del drug design e della lipidomica, è anche la coordinatrice del gruppo interdivisionale di Diffusione della Cultura Chimica della Società Chimica Italiana. Tale gruppo ha quali obiettivi "la realizzazione di workshop e scuole focalizzate su tecniche e strumenti di divulgazione e disseminazione rivolti a studenti e giovani ricercatori, e la promozione ed il coordinamento di attività volte a raccontare la chimica attraverso canali di comunicazione semplici e fruibili dal grande pubblico".

Partendo dalla sua pluriennale esperienza di divulgazione delle conoscenze chimiche, in generale, e, più in particolare, chemiometriche, la Dott.ssa Tortorella ha identificato tre punti chiave che potessero istruire la discussione con i partecipanti al workshop. In primo luogo, la proposta di operare una ricognizione su quali fossero le esperienze dei partecipanti nell'ambito della divulgazione della chemiometria, attraverso un form online, i risultati del quale saranno discussi in seguito. Gli altri due punti sui quali confrontarsi, invece, rappresentano domande fondamentali sulle quali chiunque voglia affrontare il tema della divulgazione debba interrogarsi, ovvero quale sia il pubblico al quale ci si rivolga e che sfide questo comporti e quali contenuti diffondere quando si divulghi la chemiometria. La discussione che ne è seguita è stata impreziosita dagli interventi di diversi partecipanti che hanno condiviso le proprie esperienze inquadrando nella griglia interpretativa proposta dalla Dott.ssa Tortorella.

Un capitolo a parte è rappresentato dal sondaggio aperto attraverso il form online, i cui risultati sono stati poi resi disponibili a tutti i partecipanti del workshop. Da esso, è emerso come attualmente la forma più comune di divulgazione sia attraverso attività didattiche di diversa natura, seguita a grande distanza dalla partecipazione a festival scientifici e dalla scrittura (libri/pubblicazioni). Più variegati sono risultati i destinatari delle attività di divulgazione: principalmente studenti universitari e delle scuole superiori, ma anche colleghi e, in minima parte, pubblico generico. Infine, entrando più in dettaglio nelle specifiche attività, è emerso come esse comprendano principalmente consulenze e corsi di formazione per aziende o partner progettuali, formazione di colleghi o insegnanti di scuole superiori e orientamento degli studenti liceali, anche attraverso l'alternanza-scuola lavoro.

Ad aprire l'ultima sessione del *Chemometrics Open Day*, moderata dal Prof. Davide Ballabio (Università di Milano Bicocca) focalizzata sulla tematica della diffusione della chemiometria nelle aziende, è stata la presentazione di Marco Calderisi, CEO di Kode srl, una delle prime società di consulenza scientifica operante nel campo della chemiometria in Italia.

L'utilizzo di approcci chemiometrici per l'analisi di dati chimici è ad oggi, nel contesto dell'Industria 4.0, uno dei temi di maggiore interesse. L'avanzamento tecnologico degli ultimi decenni ha permesso di sviluppare nuove strategie analitiche e migliorare quelle esistenti che attualmente, in molti casi, permettono di acquisire in modo semplice e rapido molte informazioni di natura chimica. Tra le nuove sfide troviamo quindi quella di interpretare in modo efficiente questa grande quantità di informazione, che costituisce, sotto forma di dati, una descrizione molto specifica e dettagliata dell'oggetto in analisi. I dati devono tuttavia essere elaborati con degli approcci opportuni e da qui nasce l'esigenza di utilizzare la chemiometria in ambito industriale per ottenere in modo rapido ed efficace le informazioni.

Il Dott. Calderisi ha presentato due case studies, il primo inerente all'integrazione di sensori virtuali nell'industria chimica ed il secondo relativo al monitoraggio real time di un processo produttivo, contesto nel quale lo sviluppo di strumenti basati su metodi di machine learning è fondamentale per garantire la gestione dei dati e la loro elaborazione in real time.

Successivamente, sono stati proposti tre punti di discussione sulla tematica della chemiometria nell'industria, grazie ai quali si è poi sviluppato un confronto, grazie ai numerosi interventi dei partecipanti all'evento. Il primo punto ha riguardato la tipologia di software che viene preferibilmente utilizzato in applicazioni industriali, open source oppure corporate, per lo sviluppo di applicazioni basate su algoritmi chemiometrici: la scelta open assicura solitamente una più alta flessibilità, ma non sempre viene certificata a livello aziendale. Un ulteriore punto di confronto ha riguardato la questione della qualità dei dati, fondamentale per garantire il successo delle successive analisi chemiometriche. In questo contesto, i dati dovrebbero essere raccolti e gestiti in modo ottimale ed organizzati considerando già la prospettiva della successiva analisi chemiometrica. Infine, un ultimo argomento di discussione è stato il ruolo della chemiometria nel contesto industriale, con l'augurio che questa figura venga sempre più integrata nei processi di decisione aziendale e di analisi di sistemi industriali, e non sia vista solo come una figura di intervento straordinario per la risoluzione di problematiche momentanee.

L'evento si è chiuso auspicando di poter organizzare in presenza il workshop biennale del gruppo nella primavera del 2022 a L'Aquila. Considerato il successo di partecipazione e interazione riscontrato nel *Chemometrics Open Day*, tuttavia, si prevede anche per il futuro l'organizzazione periodica di eventi telematici gratuiti di discussione e confronto.