

Attualità

CHEMOMETRICS OPEN DAY 2023

La Chemiometria oggi

**Eugenio Alladio^a, Davide Ballabio^{b,*}, Caterina Durante^c,
Barbara Giussani^d**

^aUniversità di Torino

^bUniversità di Milano Bicocca

^cUniversità di Modena e Reggio Emilia

^dUniversità dell'Insubria

*davide.ballabio@unimib.it

In continuità con l'evento organizzato nel 2021 per il ventesimo anniversario dalla sua costituzione, il gruppo 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*, tenutosi su piattaforma Webex nella mattina di giovedì 9 febbraio 2023.

Gruppo Divisionale di Chemiometria
Divisione di Chimica Analitica

CHEMOMETRICS OPEN DAY

La Chemiometria oggi

giovedì 9 febbraio 2023, 9.00-12.30

Opening lecture: «La serendipità in chimica»
tenuta da:
prof. Telmo Pievani Filosofo della Scienza, evoluzionista e divulgatore scientifico

La chemiometria nell'industria – Parteciperanno:

dott. Alessandro Malocchi	Innovation Hub Director presso Bracco S.p.A
dott. Remo Simonetti	Senior Scientist, Janssen Pharmaceutical
dott.ssa Maria Cerrato Oliveros	Technical Operations Senior Leader, Janssen Pharmaceutical
dott. Alessandro D'Alessandro	Research Manager presso Barilla G. e R. F.lli S.p.A
dott. Rosario Casamassima	Luogotenente Carabinieri - RIS Roma - Laboratorio di Microanalisi e Fotografia

L'evento si terrà online ed è **gratuito**. RegISTRAZIONI aperte fino a **martedì 31 gennaio 2023** al [sito web dell'evento](#)

Chemometrics Open Day 2023

The divisional group of Chemometrics of the SCI-Division of Analytical Chemistry organised the online meeting *Chemometrics Open Day - La Chemiometria Oggi*, which took place online on Thursday 9 February 2023. After an introductory lecture by prof. Telmo Pievani, a presentation session was held on the role and applications of chemometrics in industry, which was followed by a round table discussion.

Giovedì 9 febbraio 2023 si è svolto il meeting telematico *Chemometrics Open Day 2023 - La Chemiometria Oggi* organizzato dal gruppo divisionale di Chemiometria della Divisione di Chimica Analitica. Alla conferenza introduttiva del prof. Telmo Pievani è seguita una sessione di presentazioni sulle applicazioni della chemiometria in ambito industriale e una successiva tavola rotonda di discussione.

L'evento ha visto la presenza di 265 partecipanti, provenienti dall'accademia (58%), da enti di ricerca (16%) e da realtà industriali e di consulenza (25%) (Fig. 1). Nonostante l'evento fosse di portata nazionale, in lingua italiana, non sono mancati i collegamenti dall'estero (Francia, Danimarca, Spagna, Olanda, Ecuador e Perù).

Il *Chemometrics Open Day* si è rivelato un importante momento di riflessione sulle attività svolte dal gruppo divisionale di Chemiometria

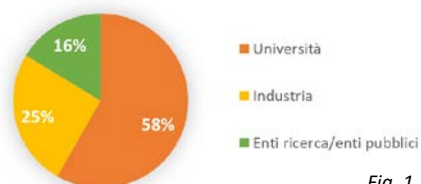


Fig. 1

negli ultimi anni, ma anche un'occasione di confronto su tematiche di grande attualità in ambito chemiometrico e una opportunità per promuovere le prossime attività del gruppo.

Il prof. Davide Ballabio (Università di Milano - Bicocca) ha aperto i lavori in qualità di attuale coordinatore del gruppo, presentandone gli scopi, ovvero promuovere la conoscenza, l'educazione, l'applicazione della Chemiometria e stimolare la partecipazione alle attività della comunità chemiometrica nazionale e internazionale, e le passate e future attività scientifiche, didattiche e di divulgazione. È stato inoltre ricordato che tutti gli aggiornamenti sono disponibili sul sito internet (<https://www.gruppochemiometria.it/>) e sui canali social (Facebook e LinkedIn) del gruppo.

In particolare, sono state menzionate le scuole organizzate dai membri afferenti, 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 in Python, che verrà organizzata presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Torino, e le scuole organizzate in collaborazione con la Società Italiana di Spettroscopia NIR (SISNIR).

Inoltre, sono stati ricordati i prossimi eventi scientifici di interesse chemiometrico, tra i quali è doveroso menzionare il prossimo Workshop nazionale del gruppo, che si svolge a cadenza biennale e sarà organizzato nella tarda primavera del 2024 a Ravenna, e l'XI Colloquium Chemiometricum Mediterraneum, conferenza scientifica internazionale di interesse chemiometrico, che si svolgerà a Padova tra il 27 ed il 30 giugno 2023.

Successivamente il prof. Telmo Pievani, filosofo della Scienza, evoluzionista e divulgatore scientifico dell'Università di Padova, ha presentato l'interessante conferenza introduttiva "*La serendipità in chimica*", nella quale è stato descritto il processo per il quale, progettando un esperimento, è possibile ottenere risultati inaspettati e attuare scoperte inattese, che possono però rivelarsi fondamentali. Il fenomeno della serendipità è stato declinato dal prof. Pievani nello specifico ambito chimico, descrivendo come alcune grandi scoperte si siano verificate secondo questo processo. È stato inoltre sottolineato come la serendipità non è relazionata al caso ed alla fortuna, ma nasce da una combinazione di fattori, quali la curiosità, la sagacia e l'immaginazione e come sia in grado di svelare i cosiddetti *unknown unknowns*, ovvero quelle relazioni e fatti che non sapevamo di non sapere. La conferenza del prof. Pievani ha stimolato l'interesse dei partecipanti, che si è manifestato nelle molteplici domande del pubblico nel successivo dibattito sui temi presentati.

È seguita un'interessante sessione tematica di discussione e confronto, coordinata dai membri della giunta del gruppo divisionale di Chemiometria (dott. Eugenio Alladio dell'Università di Torino, dott.ssa Caterina Durante dell'Università di Modena e Reggio Emilia, prof.ssa Barbara Giussani dell'Università dell'Insubria), in cui esponenti del mondo industriale sono stati invitati a presentare la loro testimonianza dell'utilizzo di metodi chemiometrici nei relativi ambiti industriali (farmaceutico, alimentare e forense), mettendone in risalto gli scopi, i benefici e gli eventuali sviluppi applicativi futuri. L'utilizzo della chemiometria è, infatti, uno dei temi di maggiore attualità nel contesto dell'Industria 4.0. L'avanzamento tecnologico consente di acquisire in modo semplice e rapido molte informazioni di natura chimica, sotto forma di dati. Di conseguenza, in ambito industriale si è sviluppata la necessità di interpretare in modo efficace questa grande quantità di informazione con opportuni approcci chemiometrici.

In particolare, il dott. Alessandro Maiocchi, Innovation Hub Director presso Bracco SpA, leader della produzione di liquidi di contrasto in ambito farmaceutico, ha inizialmente messo in evidenza l'importanza dell'utilizzo di strumenti chemiometrici nel contesto farmaceutico per lo sviluppo di nuovi prodotti farmaceutici e per il monitoraggio della qualità, presentando diversi case study in cui la chemiometria può essere utilizzata per sviluppare modelli matematici per la previsione delle proprietà del prodotto finale.

Successivamente, sono intervenuti il Dott. Remo Simonetti e la Dott.ssa Maria Concepción Cerrato Oliveros della Janssen Pharmaceutical Companies of Johnson&Johnson, azienda farmaceutica impegnata nello sviluppo e nella commercializzazione di prodotti farmaceutici innovativi. Il loro intervento si è focalizzato sull'utilizzo della chemiometria come supporto per garantire i rigorosi standard di qualità e sicurezza dei prodotti farmaceutici, ridurre i tempi di sviluppo e migliorare la produttività, ad esempio nel contesto del Process Design and Tech Transfer (MVDoE), una tecnica che permette di pianificare un processo di produzione e ridurre i tempi di sviluppo, senza compromettere la qualità del prodotto finale, e dei modelli di Health Check (RMA, Process data), utilizzati per monitorare e valutare il processo di produzione e identificare eventuali deviazioni o anomalie in tempo reale. Inoltre, sono state mostrate applicazioni chemiometriche per la definizione dei Critical Quality Attribute (CQA), proprietà del prodotto che influenzano la sua efficacia e sicurezza per il paziente.

Grazie al terzo intervento, da parte del Dott. Alessandro D'Alessandro, è stato possibile riflettere sull'importanza dell'impiego della chemiometria nell'industria alimentare. Il Dott. Alessandro D'Alessandro, Research Manager nell'Area di Ricerca, Sviluppo e Qualità presso Barilla SpA, azienda leader nel settore alimentare, ha presentato due casi di studio riguardanti la combinazione sinergica di tecniche analitiche cromatografiche e spettroscopiche come tecniche di fingerprinting e dell'analisi multivariata dei dati nel contesto della caratterizzazione chimica e del monitoraggio della qualità degli alimenti, mentre un terzo caso di studio ha evidenziato l'importanza della chemiometria nello sviluppo di carte di controllo multivariate per il monitoraggio e il controllo dei processi di produzione.

Il Dott. Rosario Casamassima, Luogotenente dei Carabinieri Reparto Investigazioni Scientifiche (RIS) di Roma - Laboratorio di Microanalisi e Fotografia -, ha infine mostrato alcuni esempi di applicazioni chemiometriche per la chimica forense, una disciplina scientifica interdisciplinare che utilizza la conoscenza della chimica per investigare sui crimini e sulle questioni legali. Una delle applicazioni più comuni della chemiometria in questo contesto riguarda l'analisi delle vernici di autoveicoli sotto sequestro al fine di confrontare i risultati con i campioni di vernice noti per determinare la marca e il modello dell'autoveicolo, caratterizzare la composizione di esplosivi e analizzare le fibre che possono essere trovate sul luogo del crimine o sui vestiti delle vittime.

È seguito un momento di dialogo tra partecipanti e relatori. Si è affrontato l'argomento della formazione universitaria, sottolineando l'importanza della conoscenza della chimica analitica e della chemiometria per gli studenti, in modo che possano poi acquisire le competenze specifiche richieste dalle aziende. Inoltre, si è evidenziato come sia utile che le aziende del territorio e le università dialoghino e collaborino per comprendere i rispettivi bisogni e costruire relazioni virtuose attraverso lo scambio di competenze. Un altro argomento di discussione è stato la comunicazione tra i diversi gruppi di lavoro all'interno delle aziende, ad esempio analisi dei dati e R&D, che può essere favorito fornendo una formazione di base sulle potenzialità della chemiometria a tutti i reparti aziendali potenzialmente interessati.

L'evento si è, infine, chiuso auspicando in futuro l'organizzazione di altri eventi telematici gratuiti di discussione e confronto su tematiche chemiometriche, considerato il successo di partecipazione e interazione riscontrato sia nella precedente che in questa ultima edizione del *Chemometrics Open Day*.