Domani 03/12 non ci sarà lezione frontale, né esperienza mieli

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI TRIESTE

Dipartimento di Scienze Politiche e Sociali DiSPeS

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI TRIESTE ensuEU JEAN MONNET MODULE Co-funded by the Erasmus+ Programme of the European Union

30 YEARS OF JEAN MONNET ACTIVITIES

LA SICUREZZA ALIMENTARE IN UNIONE EUROPEA

Martedì 3 dicembre 2019
Ore 10.00 – Aula Magna
Polo Universitario di Gorizia – Via Alviano 18

Quanto sono sicuri gli alimenti che portiamo in tavola? Da questo interrogativo ne discendono altri più articolati a cui il presente seminario intende offrire delle risposte. In una prospettiva multidisciplinare e nel contesto dell'Unione europea, ci si chiede quali enti e soggetti valutino i rischi nell'ambito della sicurezza alimentare e in base a che principi e procedimenti; quali regole si applichino per l'uso e la commercializzazione dei pesticidi; come venga garantita la sicurezza degli alimenti che provengono da paesi terzi all'Unione europea; e, infine, come si intrecci la svolta della responsabilità sociale delle politiche della ricerca in Europa con la ricerca in campo alimentare.

Il seminario, organizzato dal Dipartimento di Scienze politiche e sociali dell'Università degli Studi di Trieste, ricade nell'ambito del progetto "*Environmental Sustainability in Europe: a socio-legal perspective - EnSuEu*" co-finanziato dall'Unione europea tramite le azioni Moduli Jean Monnet (resp. scient.: prof.ssa Serena Baldin).

10.15 **Relazioni**

Presiede **SERENA BALDIN**, Prof.ssa associata di Diritto pubblico comparato - Università degli Studi di Trieste

PIERLUIGI BARBIERI, Prof. associato di Chimica dell'Ambiente e dei Beni culturali - Università degli Studi di Trieste

L'approccio del "peso dell'evidenza" nella valutazione dei rischi

MARCO BINAGLIA, Senior Scientific Officer, CONTAM Team Leader - European Food Security Agency

Ruolo e funzioni dell'Autorità europea per la sicurezza alimentare (in videoconferenza)

SARA DE VIDO, Prof.ssa associata di Diritto internazionale - Università Ca' Foscari di Venezia

Sicurezza alimentare e principio di precauzione nell'Unione europea

ROBERTO FUSCO, Avvocato - Foro di Trieste

L'autorizzazione all'utilizzo e alla commercializzazione dei pesticidi: il caso del glifosato

ANCA ALEXANDRA DAVID, Dottoranda di Diritto internazionale - Università Ca' Foscari di Venezia

La sicurezza alimentare negli accordi dell'Unione europea con paesi terzi

SIMONE ARNALDI, Prof. aggregato di Sociologia generale - Università degli Studi di Trieste

Principio di proazione e politiche della scienza nell'Unione europea

Pomeriggio elezione di coordinatore di cdl interateneo a Udine

Gruppo recupera giovedì 12/12

Introduzione alla chemiometria

Chemiometria

Matematica

Statistica

Scienze dell'Informazione

In Chimica

Discipline simili

- Biometrics ±1900
- Psychometrics ±1930
- Econometrics ±1950
- Technometrics ±1960

Qualche dato storico

- **Nome proposto originariamente nei primi anni 1970 dal chimico organico svedese Svante Wold.**
- **International Chemometrics Society - 1970s.**
- **Meeting Internazionale - Cosenza 1983**
- **Riviste : 1986 (Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems) and 1987 (J Chemometrics)**
- **Libri : metà anni 1980**
- **Corsi : nei tardi anni 1980 principalmente come formazione professionale continua.**

Cosa è la chemiometria

La chemiometria è un settore della chimica che studia l'applicazione dei metodi matematici o statistici ai dati chimici. La International Chemometrics Society (ICS) ne da la seguente definizione: *la chemiometria è la scienza di relazionare le misure effettuate su un sistema o su un processo chimico allo stato del sistema via applicazione di metodi matematici o statistici*.

http://www.gruppochemiometria.it

Gruppo di Chemiometria

Divisione di Chimica Analitica
Società Chimica Italiana

Cosa è la Chemiometria

La chemiometria è un settore della chimica che studia l'applicazione dei metodi matematici o statistici ai dati chimici. La International Chemometrics Society (ICS) ne dà la seguente definizione: "la chemiometria è la scienza di relazionare le misure effettuate su un sistema o su un processo chimico allo stato del sistema via applicazione di metodi matematici o statistici",

"a chemical discipline that uses mathematical and statistical methods to: design/select optimal procedures and experiments, provide maximum chemical information by analysing data, give a graphical representation of this information, in other words information aspects of chemistry"

La chemiometria può essere definita come la branca della chimica che si serve di metodi matematici, statistici e logici per:

- progettare, selezionare ed ottimizzare procedure ed esperimenti;
- estrarre la massima informazione possibile sul sistema in esame attraverso l'analisi dei dati;
- fornire una rappresentazione grafica di questa informazione.

Appare chiaro come la chemiometria accompagni il processo chimico, ed in particolare chimico-analitico, lungo tutte le sue fasi a partire dal campionamento fino all'ottimizzazione.

Chi siamo

Fin dai suoi inizi, alla metà degli anni 70, la chemiometria ha visto svilupparsi un'importante comunità anche in Italia, comunità che è andata via via accrescendosi col tempo. Sulla scorta di ciò, nel 2001 è stato costituito, nell'ambito della Divisione di Chimica Analitica della Società Chimica Italiana, **il Gruppo divisionale di Chemiometria**, il cui obiettivo è di raccogliere tutte le persone che mostrino interesse verso la disciplina indipendentemente dal settore in cui esse operino (analitico e non, accademia, enti, industria..), allo scopo di promuovere la conoscenza, l'educazione, l'applicazione, implementazione di nuovi metodi, e di stimolare la partecipazione alle attività della comunità chemiometrica internazionale.
E' da sottolineare come uno degli scopi principali del gruppo sia quello di rivolgersi a persone che si trovino a contatto con la chemiometria anche solo occasionalmente, magari per la soluzione di un problema specifico e che non vogliano o

Riunione del Gruppo

L'ultima edizione del **workshop del Gruppo di Chemiometria** ha avuto luogo a **Bergamo, dal 25 al 27 febbraio 2019**.

Maggiori informazioni qui.

Prossime scuole

- Scuola nazionale di Chemiometria applicata ai beni culturali, 10 - 13 Febbraio 2020, Ravenna
- Scuola di Chemiometria (Experimental Design), 11 - 15 Novembre 2019 (in English), 8-12 Giugno 2020, 9-13 Novembre 2020 (in English), Genova
- Scuola di Chemiometria (Analisi Multivariata), 13-17 Gennaio 2020 (in English), 21-25 Settembre 2020, Genova

«…La spettroscopia NIR è ormai riconosciuta come una delle tecniche più versatili ed efficaci nell'ambito dell'**analisi rapida e non distruttiva** di alimenti, matrici ambientali, di prodotti/manufatti industriali e artigianali, intermedi di processo ecc. In particolare, per i **suoi costi contenuti, la possibilità di essere implementata at-/on-/in-line, la vasta gamma di soluzioni portatili e miniaturizzate** è diventata la **tecnica di riferimento in molti ambiti per il controllo di qualità ed il monitoraggio di processo**. La regione spettrale NIR comprende gli ***assorbimenti dovuti agli overtones (transizioni da numero quantico vibrazionale v=0 a v=2) e alle bande di combinazione***, è pertanto una **regione molto sensibile alle modificazioni dell'intorno chimico in cui sono inseriti i legami/gruppi funzionali che danno luogo ad assorbimenti,** d'altro canto è anche caratterizzata da **bande fortemente sovrapposte e variabilità dovuta alle caratteristiche fisiche del campione e alle condizioni di misura**; per estrarre informazioni utili dai profili spettrali NIR, acquisiti su matrici complesse, è quasi **imprescindibile l'uso di metodi chemiometrici** (analisi multivariata dei segnali)…»

Marina Cocchi, Tiziana Cattaneo «Focus sulla spettroscopia NIR»
https://www.soc.chim.it/sites/default/files/chimind/pdf/2014_9_3733_on.pdf

https://chem.libretexts.org/Textbook_Maps/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Spectroscopy/Vibrational_Spectroscopy/Vibrational_Modes/Combination_Bands%2C_Overtones_and_Fermi_Resonances

Altre definizioni…

”A chemical discipline that uses mathematical and statistical methods to: design/select optimal procedures and experiments, provide maximum chemical information by analysing data, give a graphical representation of this information, in other words… information aspects of chemistry” (D.L.Massart)

La chemiometria può essere definita come la branca della chimica che si serve di metodi matematici, statistici e logici per:

- progettare, selezionare ed ottimizzare procedure ed esperimenti;
- estrarre la massima informazione possibile sul sistema in esame attraverso l’analisi dei dati;
- fornire una rappresentazione grafica di questa informazione.

(modificato da http://www.iupac.org/publications/pac/pdf/1983/pdf/5512x1861.pdf)

Appare chiaro come la chemiometria accompagni il processo chimico, ed in particolare chimico-analitico, lungo tutte le sue fasi a partire dal campionamento fino all'ottimizzazione.

Campi di applicazione della chemiometria

Tra i campi d'applicazione della chemiometria si possono citare:

- Controllo di qualità
- Monitoraggio e controllo di processo
- Tracciabilità degli alimenti
- QSAR/QSPR e REACH
- Genomica, proteomica e metabolomica
- Progettazione degli esperimenti e Ottimizzazione
- Progettazione di Farmaci e materiali (*Drug & material design*)
- Analisi di immagini
- Applicazioni in ambito industriale e ambientale

Analisi Multivariata dei Dati

- Dati campionati e progetti con molte risposte anche da:
  - Attività minerarie
  - Ospedali
  - Agricultura
  - Industria alimentare
  - Etc.

La Chemiometria è una disciplina per l'analisi dei dati che:

- Tratta dati **multivariati** (e "**multiway**")
- Si basa su modellizzazione **soft**
- Usa **metodi di proiezione** e il concetto di **variabili latenti**
- Considera i **dati** come **informazione + rumore**
- Considera il **rumore** come **informazione inutile**

Nomenclatura

- I campioni sono oggetti
- Ciò che è misurato su un oggetto è una variabile

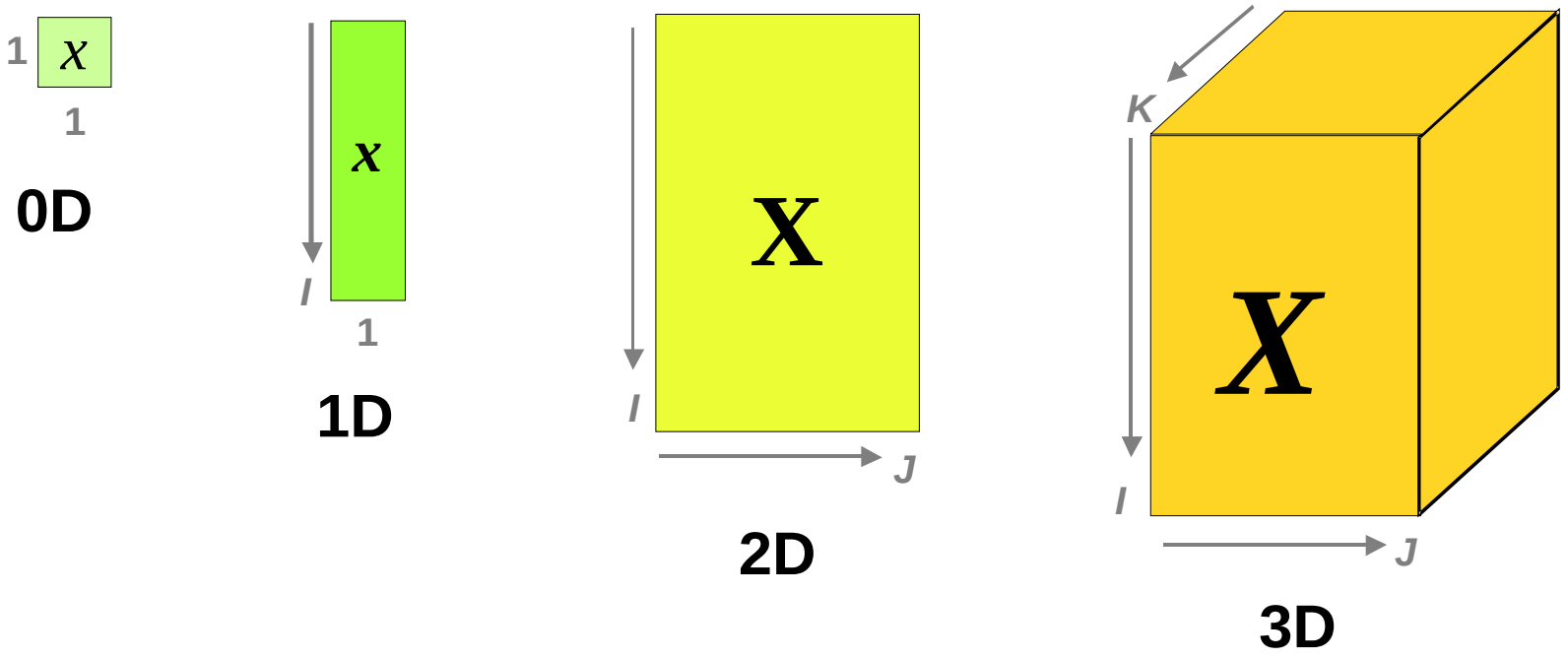
Dati multivariati

Variabili

Campioni

	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7	X8	X9	X10	X11	X12	X13	X14	X15
s1	-1.19E-01	7.28E-01	-2.15E-02	5.22E-01	7.06E-04	7.32E-01	3.10E-04	-6.13E-04	-5.92E-05	1.28E+00	1.32E+00	-7.03E-02	1.23E-03	4.67E-01	-4.21E-
s2	-1.37E-01	7.28E-01	-2.89E-02	6.08E-01	7.09E-04	7.02E-01	6.58E-04	-1.22E-03	-1.49E-04	1.35E+00	1.39E+00	-3.27E-01	2.48E-04	4.84E-01	-2.94E-
s3	2.51E-02	-9.15E-02	6.73E-03	-1.13E-01	-9.07E-05	-7.58E-02	-2.29E-04	4.10E-04	5.65E-05	-1.96E-01	-2.02E-01	1.49E-01	3.83E-04	-6.80E-02	1.43E-
s4	-1.14E-01	6.70E-01	-2.18E-02	5.04E-01	6.50E-04	6.65E-01	3.83E-04	-7.34E-04	-7.96E-05	1.20E+00	1.24E+00	-1.36E-01	8.59E-04	4.34E-01	-1.09E-
s5	-7.93E-02	4.14E-01	-1.69E-02	3.51E-01	4.04E-04	3.98E-01	3.96E-04	-7.35E-04	-9.05E-05	7.71E-01	7.94E-01	-2.02E-01	7.80E-05	2.76E-01	-1.83E-
s6	1.51E-02	-6.38E-02	3.74E-03	-6.75E-02	-6.28E-05	-5.67E-02	-1.15E-04	2.07E-04	2.78E-05	-1.29E-01	-1.33E-01	7.08E-02	1.40E-04	-4.52E-02	6.71E-
s7	7.44E-02	-5.24E-01	1.11E-02	-3.24E-01	-5.06E-04	-5.45E-01	-1.73E-05	7.92E-05	-1.07E-05	-8.87E-01	-9.13E-01	-1.02E-01	-1.47E-03	-3.26E-01	-1.19E-
s8	3.65E-02	-2.66E-01	5.12E-03	-1.59E-01	-2.56E-04	-2.78E-01	1.43E-05	-3.95E-07	-1.14E-05	-4.46E-01	-4.59E-01	-6.86E-02	-8.12E-04	-1.64E-01	-7.71E-
s9	1.36E-01	-7.06E-01	2.89E-02	-6.01E-01	-6.88E-04	-6.77E-01	-6.83E-04	1.26E-03	1.56E-04	-1.31E+00	-1.35E+00	3.50E-01	-1.12E-04	-4.71E-01	3.18E-
s10	-2.74E-02	3.60E-01	1.82E-03	1.12E-01	3.42E-04	4.12E-01	-4.31E-04	7.24E-04	1.22E-04	5.29E-01	5.43E-01	3.97E-01	2.27E-03	2.02E-01	4.03E-
s11	7.47E-02	-3.31E-01	1.80E-02	-3.34E-01	-3.25E-04	-2.99E-01	-5.30E-04	9.62E-04	1.28E-04	-6.54E-01	-6.74E-01	3.20E-01	5.44E-04	-2.31E-01	3.01E-
s12	-1.17E-01	7.02E-01	-2.16E-02	5.13E-01	6.81E-04	7.03E-01	3.40E-04	-6.63E-04	-6.76E-05	1.25E+00	1.28E+00	-9.79E-02	1.07E-03	4.52E-01	-7.02E-
s13	1.06E-01	-2.82E-01	3.23E-02	-4.82E-01	-2.85E-04	-1.87E-01	-1.25E-03	2.21E-03	3.14E-04	-7.01E-01	-7.25E-01	8.59E-01	2.71E-03	-2.36E-01	8.33E-
s14	7.39E-02	-5.28E-01	1.07E-02	-3.21E-01	-5.09E-04	-5.50E-01	2.49E-06	4.48E-05	-1.59E-05	-8.90E-01	-9.15E-01	-1.17E-01	-1.54E-03	-3.27E-01	-1.34E-
s15	-9.87E-03	1.02E-01	-3.21E-04	4.17E-02	9.75E-05	1.13E-01	-8.29E-05	1.36E-04	2.44E-05	1.57E-01	1.61E-01	8.35E-02	5.31E-04	5.92E-02	8.57E-
s16	-1.06E-01	7.68E-01	-1.52E-02	4.62E-01	7.41E-04	8.03E-01	-2.54E-05	-2.68E-05	2.88E-05	1.29E+00	1.33E+00	1.86E-01	2.30E-03	4.75E-01	2.11E-
s17	-4.76E-02	2.66E-01	-9.52E-03	2.10E-01	2.59E-04	2.61E-01	1.92E-04	-3.61E-04	-4.19E-05	4.84E-01	4.99E-01	-8.35E-02	2.29E-04	1.75E-01	-7.21E-
s18	9.54E-02	-6.55E-01	1.48E-02	-4.16E-01	-6.33E-04	-6.77E-01	-6.69E-05	1.79E-04	-1.61E-06	-1.12E+00	-1.15E+00	-9.35E-02	-1.71E-03	-4.10E-01	-1.16E-
s19	-1.32E-01	5.01E-01	-3.49E-02	5.94E-01	4.96E-04	4.22E-01	1.16E-03	-2.09E-03	-2.86E-04	1.06E+00	1.09E+00	-7.49E-01	-1.84E-03	3.68E-01	-7.17E-
s20	8.91E-02	-4.23E-01	2.05E-02	-3.97E-01	-4.14E-04	-3.94E-01	-5.56E-04	1.02E-03	1.32E-04	-8.15E-01	-8.40E-01	3.19E-01	3.49E-04	-2.90E-01	2.97E-
s21	-8.91E-02	5.08E-01	-1.75E-02	3.93E-01	4.94E-04	5.01E-01	3.34E-04	-6.35E-04	-7.18E-05	9.17E-01	9.45E-01	-1.36E-01	5.26E-04	3.31E-01	-1.15E-
s22	1.15E-01	-6.22E-01	2.39E-02	-5.10E-01	-6.06E-04	-6.04E-01	-5.25E-04	9.79E-04	1.18E-04	-1.14E+00	-1.18E+00	2.52E-01	-3.18E-04	-4.12E-01	2.24E-
s23	-4.08E-02	5.43E-01	2.94E-03	1.67E-01	5.17E-04	6.22E-01	-6.60E-04	1.11E-03	1.86E-04	7.96E-01	8.18E-01	6.06E-01	3.45E-03	3.04E-01	6.15E-
s24	9.92E-02	-6.00E-01	1.82E-02	-4.36E-01	-5.82E-04	-6.02E-01	-2.81E-04	5.49E-04	5.53E-05	-1.06E+00	-1.09E+00	7.64E-02	-9.46E-04	-3.86E-01	5.28E-
s25	1.08E-01	-5.37E-01	2.40E-02	-4.81E-01	-5.25E-04	-5.07E-01	-6.15E-04	1.13E-03	1.43E-04	-1.02E+00	-1.05E+00	3.37E-01	1.85E-04	-3.63E-01	3.11E-
s26	-6.95E-02	4.56E-01	-1.15E-02	3.04E-01	4.41E-04	4.67E-01	1.03E-04	-2.23E-04	-1.34E-05	7.88E-01	8.11E-01	2.38E-02	1.03E-03	2.88E-01	4.01E-
s27	4.90E-02	-1.23E-01	1.51E-02	-2.22E-01	-1.25E-04	-7.71E-02	-5.94E-04	1.05E-03	1.50E-04	-3.15E-01	-3.25E-01	4.12E-01	1.33E-03	-1.05E-01	4.00E-
s28	-1.65E-03	-7.79E-02	-3.41E-03	1.09E-02	-7.26E-05	-1.01E-01	2.35E-04	-4.05E-04	-6.30E-05	-8.88E-02	-9.08E-02	-1.91E-01	-8.92E-04	-3.68E-02	-1.90E-
s29	8.73E-02	-5.70E-01	1.46E-02	-3.82E-01	-5.52E-04	-5.83E-01	-1.37E-04	2.94E-04	1.91E-05	-9.87E-01	-1.02E+00	-2.30E-02	-1.27E-03	-3.61E-01	-4.36E-
s30	-6.93E-02	6.98E-02	-2.51E-02	3.19E-01	7.94E-05	-2.22E-02	1.11E-03	-1.96E-03	-2.85E-04	3.19E-01	3.31E-01	-8.06E-01	-2.95E-03	9.79E-02	-7.88E-
s31	-8.99E-02	3.66E-01	-2.28E-02	4.03E-01	3.61E-04	3.20E-01	7.21E-04	-1.30E-03	-1.76E-04	7.48E-01	7.72E-01	-4.52E-01	-9.80E-04	2.63E-01	-4.30E-
s32	-6.32E-02	2.05E-01	-1.79E-02	2.85E-01	2.05E-04	1.59E-01	6.44E-04	-1.15E-03	-1.61E-04	4.63E-01	4.78E-01	-4.31E-01	-1.23E-03	1.59E-01	-4.15E-
s33	-1.42E-01	6.98E-01	-3.20E-02	6.33E-01	6.83E-04	6.57E-01	8.32E-04	-1.53E-03	-1.95E-04	1.33E+00	1.37E+00	-4.62E-01	-3.32E-04	4.74E-01	-4.28E-
s34	1.32E-01	-6.89E-01	2.81E-02	-5.85E-01	-6.72E-04	-6.62E-01	-6.61E-04	1.23E-03	1.51E-04	-1.28E+00	-1.32E+00	3.38E-01	-1.27E-04	-4.60E-01	3.06E-
s35	-1.08E-01	4.80E-01	-2.61E-02	4.84E-01	4.72E-04	4.35E-01	7.66E-04	-1.39E-03	-1.84E-04	9.49E-01	9.79E-01	-4.61E-01	-7.76E-04	3.36E-01	-4.34E-
s36	2.13E-02	-2.11E-01	9.91E-04	-9.02E-02	-2.02E-04	-2.34E-01	1.57E-04	-2.55E-04	-4.66E-05	-3.28E-01	-3.38E-01	-1.62E-01	-1.06E-03	-1.24E-01	-1.67E-
s37	-2.39E-03	4.55E-03	-7.90E-04	1.09E-02	4.75E-06	1.94E-03	3.28E-05	-5.80E-05	-8.35E-06	1.36E-02	1.41E-02	-2.32E-02	-7.97E-05	4.43E-03	-2.26E-
s38	6.29E-02	-3.26E-01	1.35E-02	-2.79E-01	-3.18E-04	-3.13E-01	-3.21E-04	5.94E-04	7.36E-05	-6.09E-01	-6.27E-01	1.66E-01	-3.74E-05	-2.18E-01	1.51E-
s39	1.02E-01	-5.03E-01	2.26E-02	-4.51E-01	-4.91E-04	-4.74E-01	-5.80E-04	1.07E-03	1.35E-04	-9.53E-01	-9.83E-01	3.19E-01	1.85E-04	-3.40E-01	2.94E-
s40	1.00E-01	-4.22E-01	2.50E-02	-4.49E-01	-4.16E-04	-3.75E-01	-7.68E-04	1.39E-03	1.86E-04	-8.52E-01	-8.79E-01	4.75E-01	9.52E-04	-3.00E-01	4.51E-
s41	7.05E-02	-3.24E-01	1.66E-02	-3.14E-01	-3.17E-04	-2.97E-01	-4.70E-04	8.56E-04	1.12E-04	-6.31E-01	-6.51E-01	2.77E-01	3.94E-04	-2.24E-01	2.60E-
s42	-7.27E-02	3.21E-01	-1.76E-02	3.24E-01	3.15E-04	2.90E-01	5.17E-04	-9.38E-04	-1.25E-04	6.35E-01	6.55E-01	-3.12E-01	-5.35E-04	2.25E-01	-2.94E-
s43	-3.34E-02	2.26E-01	-5.31E-03	1.46E-01	2.18E-04	2.33E-01	3.24E-05	-7.79E-05	-1.84E-06	3.87E-01	3.98E-01	2.54E-02	5.64E-04	1.42E-01	3.33E-
s44	-1.36E-01	6.25E-01	-3.21E-02	6.08E-01	6.13E-04	5.73E-01	9.11E-04	-1.66E-03	-2.18E-04	1.22E+00	1.26E+00	-5.37E-01	-7.70E-04	4.32E-01	-5.04E-
s46	2.41E-02	-1.53E-01	4.17E-03	-1.06E-01	-1.48E-04	-1.55E-01	-4.92E-05	1.01E-04	8.29E-06	-2.67E-01	-2.75E-01	2.90E-03	-3.05E-04	-9.74E-02	-2.79E-
s47	-9.11E-02	4.29E-01	-2.11E-02	4.06E-01	4.21E-04	3.98E-01	5.77E-04	-1.05E-03	-1.37E-04	8.29E-01	8.55E-01	-3.33E-01	-3.91E-04	2.95E-01	-3.11E-
s49	5.84E-02	-2.37E-01	1.49E-02	-2.62E-01	-2.34E-04	-2.07E-01	-4.71E-04	8.49E-04	1.15E-04	-4.85E-01	-5.00E-01	2.96E-01	6.47E-04	-1.70E-01	2.82E-
s50	-4.05E-02	2.15E-01	-8.50E-03	1.79E-01	2.10E-04	2.08E-01	1.93E-04	-3.58E-04	-4.36E-05	3.98E-01	4.10E-01	-9.53E-02	7.91E-05	1.43E-01	-8.56E-

dati **multivariati** (e “**multiway**”)



Molti inputs inducono un effetto

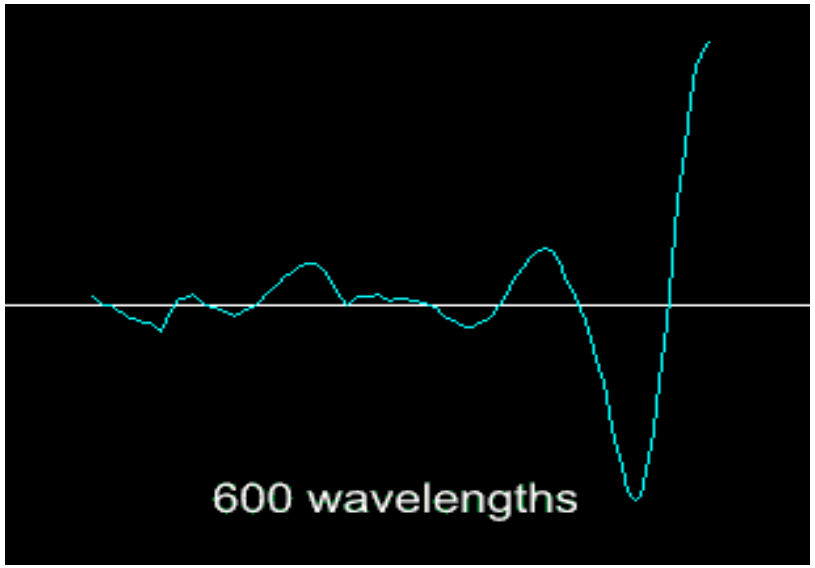
Molti effetti sono derivati da un input

etc

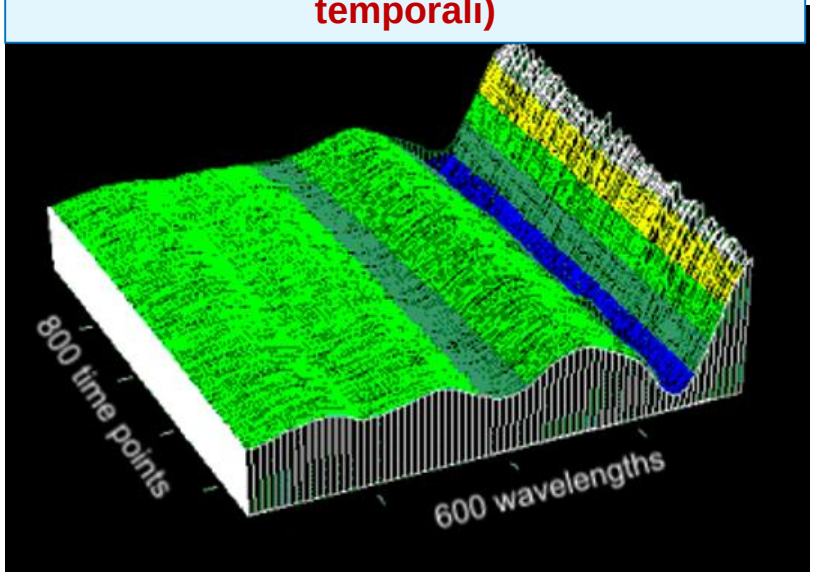
dati **multivariati** (e “**multiway**”)

Molte variabili e molti campioni

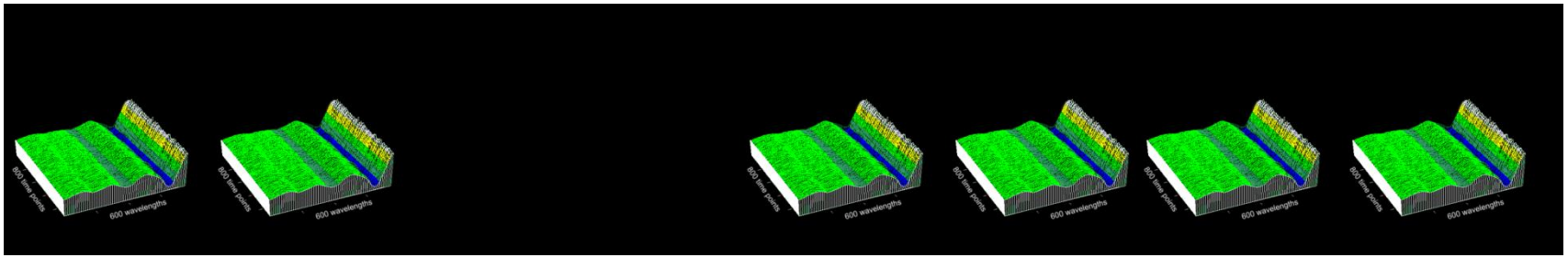
Una misura – spettro (600 punti)



Un "batch" – 800 spettri (suddivisioni temporali)



Un set di dati – 200 campioni (batches)



dati **multivariati** (e "**multiway**")

34.92

Spettro

Campioni

1

I

1

K

Vettori

Un vettore è una raccolta di numeri.

E’ sempre un vettore colonna

12.0 3.6 11.1 5.9 34.0 0.5 1.4 17.0

La trasposta di un vettore è un vettore riga.
I simboli per indicare la trasposizione sono ’ o ^{T}.
Es. **a**’ o **a**^{T}.

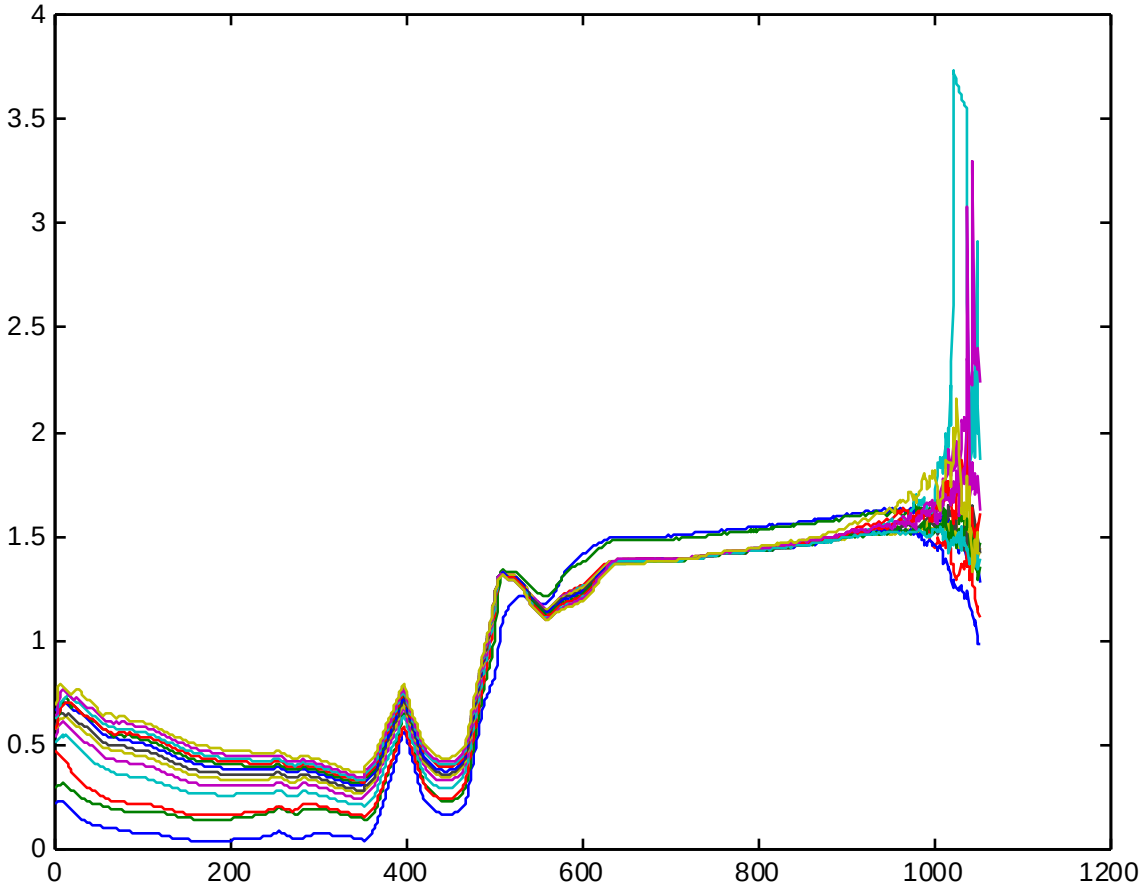
La matrice dei dati

K

Una matrice di dati
è un vettore di vettori

I

Tempi in una reazione batch



Lunghezze d’onda NIR

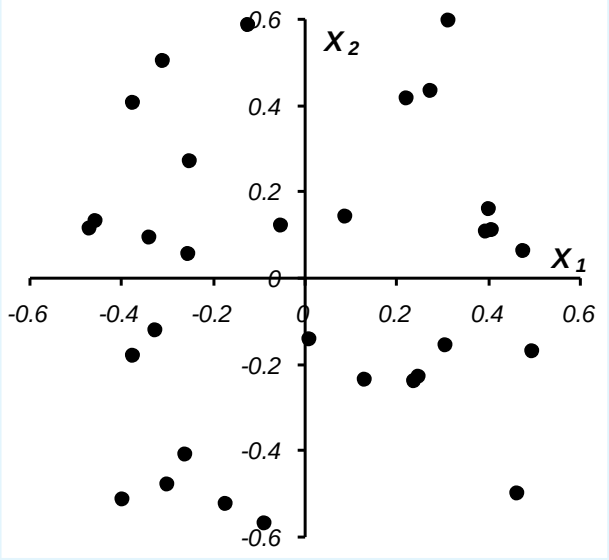
Modelli “hard” e “soft”

	Modelli “hard”	Modelli “soft”
Origine	Da conoscenza *a priori*	Dai dati
Formula	$\mathbf{y}=f(\mathbf{x},\mathbf{a})+\boldsymbol{\varepsilon}$	$\mathbf{y}=\mathbf{X}\mathbf{a}+\boldsymbol{\varepsilon}$
Parametri	Hanno significato fisico esplicito	Non c’è significato fisico “esplicito”
Problema	formulazione di modelli	Analisi dei dati
Scopo	estrapolazione	interpolazione
Example	Beer-Lambert	ANOVA

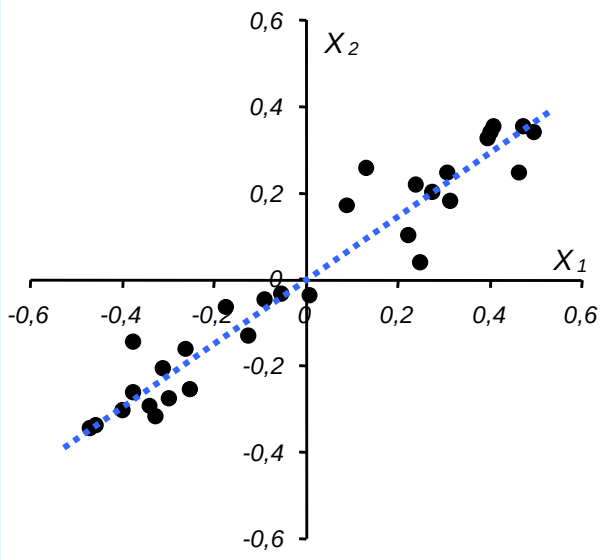
Es. L'**analisi della varianza** (**ANOVA**) è un insieme di tecniche statistiche che permettono di confrontare due o più gruppi di dati confrontando la variabilità *interna* a questi gruppi con la variabilità *tra* i gruppi. Si confrontano medie di due o più campioni tenendo conto contemporaneamente di più variabili.

Metodi di proiezione e variabili latenti

Dati senza struttura



Dati con una struttura nascosta



In statistica per **correlazione** si intende una relazione tra due variabili tale che a ciascun valore della prima variabile corrisponda con una certa regolarità un valore della seconda. Non si tratta necessariamente di un rapporto di causa ed effetto, ma semplicemente della tendenza di una variabile a variare in funzione di un'altra.

$$-1 \leq \rho_{xy} = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_x \sigma_y} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \mu_x)(y_i - \mu_y)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \mu_x)^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \mu_y)^2}} \leq +1$$

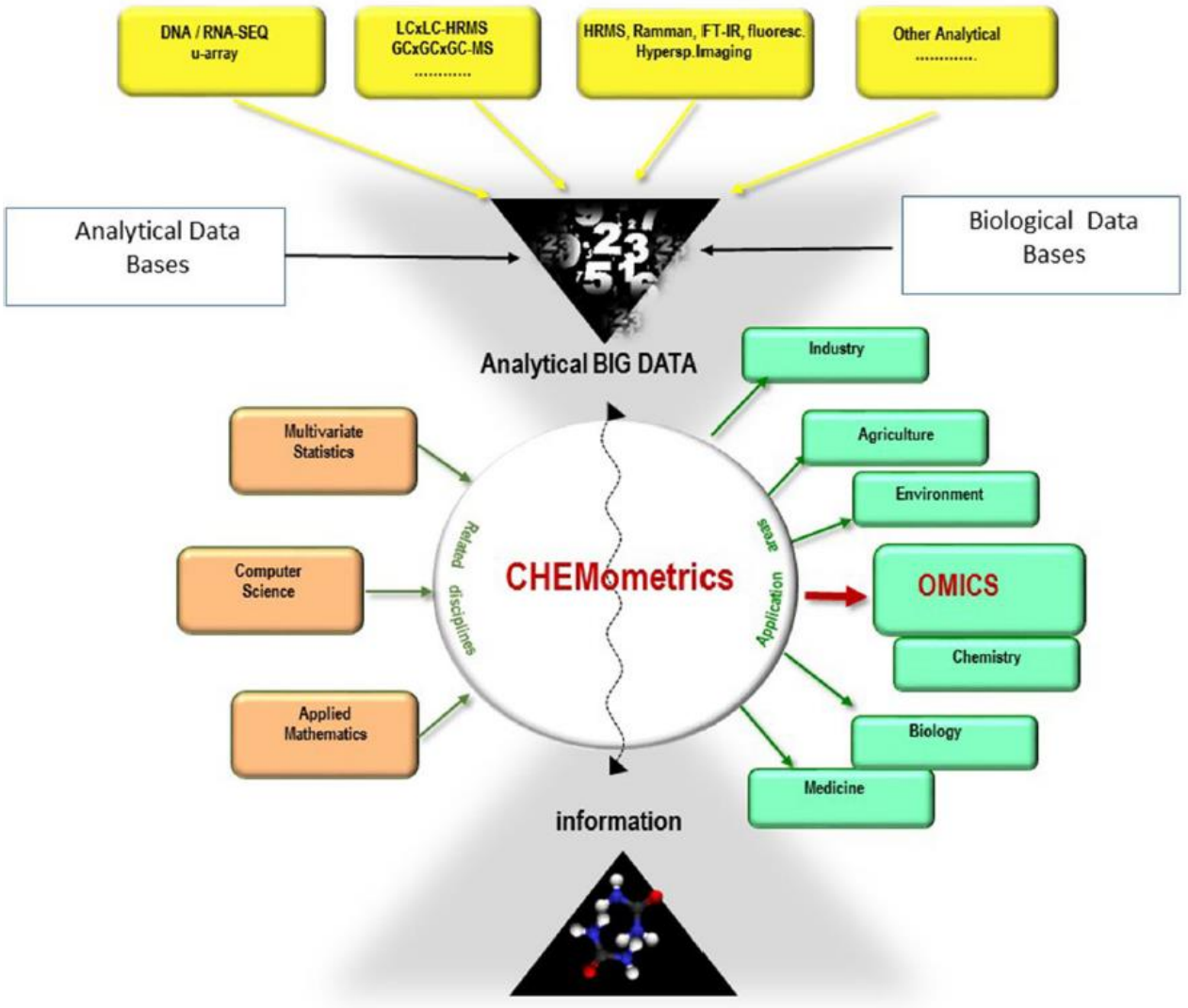
Grandi ”aree” della Chemiometria

1. Progettazione degli esperimenti (DOE - *Design of Experiments*)
2. Analisi esplorativa dei dati (EDA - *Exploratory Data Analysis*)
3. Classificazione (*Classification*)
4. Regressione e calibrazione (*Regression and Calibration*)

In ciascuna ”area” ci sono molti metodi

Brereton et al. 2017, Chemometrics in analytical chemistry—part I: history, experimental design and data analysis tools
http://rcs.chemometrics.ru/papers/ABC409_5891.pdf
Brereton et al. 2018, Chemometrics in analytical chemistry—part II: modeling, validation, and applications DOI: 10.1007/s00216-018-1283-4

Fig. 1 Chemometrics as an interdisciplinary field



Brereton, 2018

1) **Progettazione degli esperimenti**

(*Design of Experiments o Experimental Design)*

Di estrema importanza, da applicare ove possibile

Impiega:

- ANOVA
- F-test
- t-test
- Diagrammi
- Superfici di risposta

RECUPERARE E LEGGERE

Riccardo Leardi

«Experimental design in chemistry: A tutorial»

Analytica Chimica Acta Volume 652, Issues 1-2, 2009, Pages 161-172

Progettazione degli esperimenti

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \ldots + b_Kx_K + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + \ldots + b_{KK}x_K^2 + b_{12}x_1x_2 + \ldots + \varepsilon$$

I Fattori $x_1, x_2, \ldots x_K$ possono essere modificati sistematicamente

La Risposta y è misurata e modellata

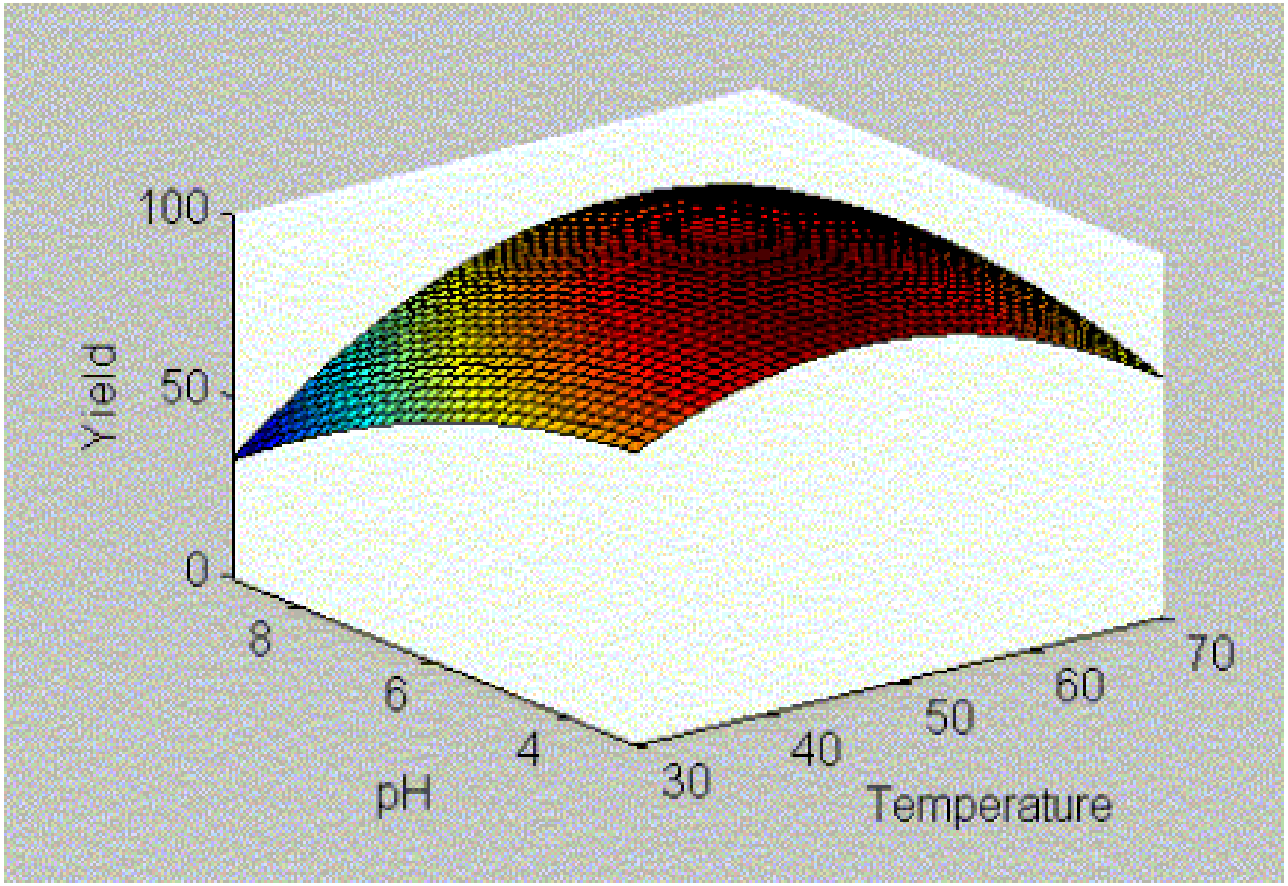
Perché progettare gli esperimenti

- *Screening* (per capire quali sono le variabili importanti nel determinare il valore di una risposta)
- *Saving time* (per risparmiare tempo)
- *Quantitative modelling* (per costruire un modello quantitativo dell'esperimento)
- *Optimisation* (per massimizzare rese di reazione, ottimizzare tempi, consumo di reagenti …)

Perché progettare gli esperimenti?

Un problema : Ottimizzazione di una resa di reazione con pH e temperatura.

Possiamo trovare la combinazione di pH e temperatura che producono la resa migliore della reazione?

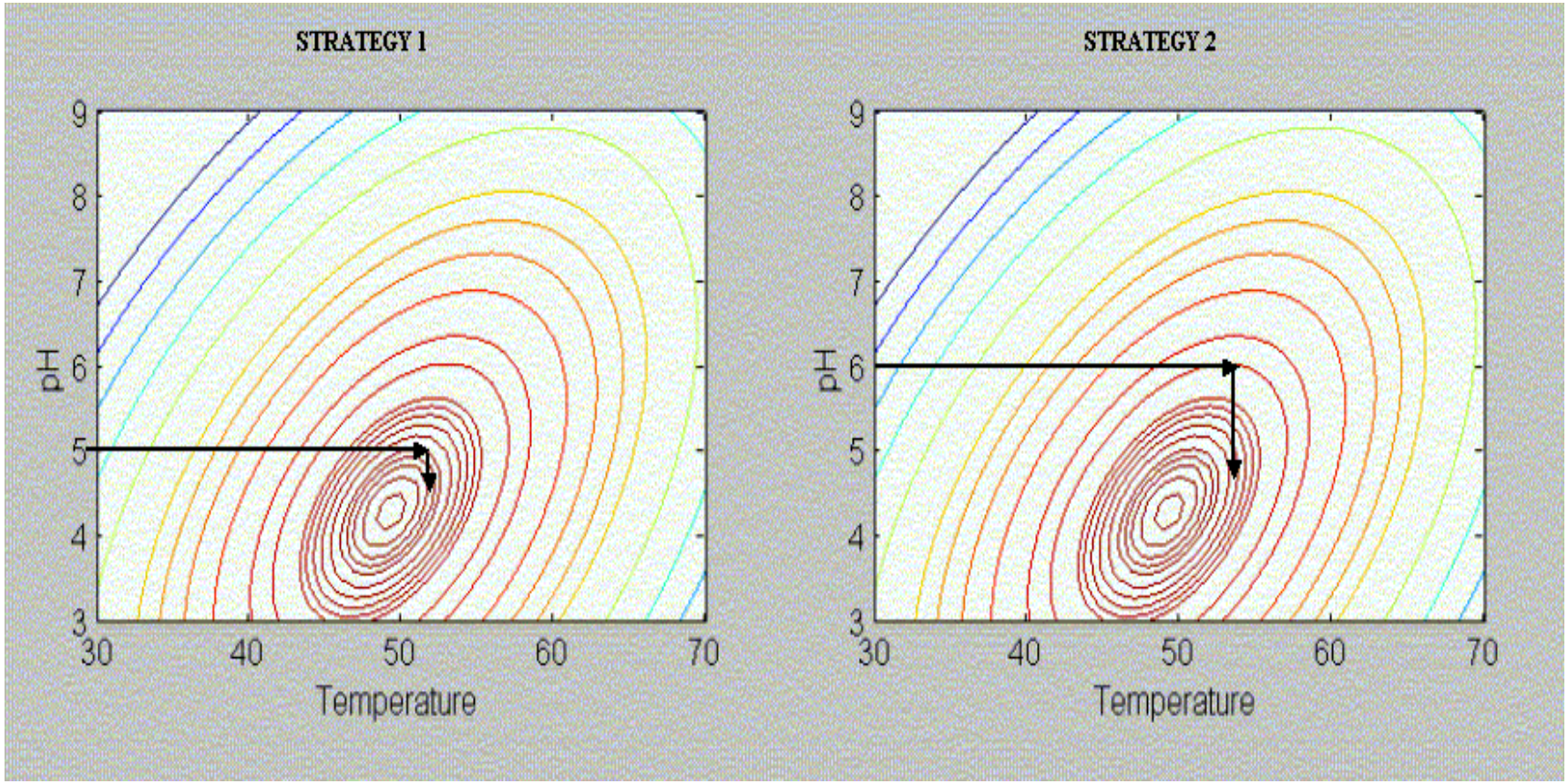


Progettazione degli esperimenti

La strategia di variare un fattore alla volta

(*One Variable At Time)*:

può mancare di cogliere l' "ottimo"



DIFFICOLTA’

Interazioni – la risposta per ciascun fattore non è indipendente

La temperatura ottimale a pH 5 è diversa da quella a pH 6.

Come affrontare il problema? Forza bruta?

- **Una griglia di esperimenti (*Grid search*).**
10 pHs, 10 temperatures, 100 experiments.

- **Si inizia con una griglia a maglia larga.**
Poi a maglia più stretta.

Controindicazioni

- **Dispendioso in termini di tempo e denaro.**
- **Molti esperimenti vengono condotti in aree del dominio sperimentale che sono quasi sicuramente “non vicine” a un ottimo (quindi una perdita di tempo e denaro)**
- **Come stimare riproducibilità ed errore sperimentale? (Altri esperimenti, replica dei precedenti ?!?)**

Che facciamo?

Abbiamo bisogno di regole !

La progettazione formale degli esperimenti

Analytica Chimica Acta Volume 652, Issues 1-2,
12 October 2009, Pages 161-172
Experimental design in chemistry: A tutorial
Riccardo Leardi,
https://www.academia.edu/237865/Experimental_Design_in_Chemistry_a_Tutorial

Screening

- **Factorial designs**
- **Partial factorials and Plackett-Burman designs**

Modelling and optimisation

- **Response surface designs**
- **Mixture designs**

Divisione di Chimica Analitica
SOCIETÀ CHIMICA ITALIANA

GRUPPO DIVISIONALE DI CHEMIOMETRIA

UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI GENOVA

The Research Group of Analytical Chemistry and Chemometrics, of the Department of Pharmacy of the University of Genoa organizes a SCHOOL OF EXPERIMENTAL DESIGN (May 27-31, 2019).

Program:
27 May 10:00 – 13:00 (optional): basics of univariate statistics and introduction to multivariate analysis (PCA).
27 May 14:00 – 31 May 13:00: Full Factorial Designs, Screening Designs, Fractional Factorial Designs, Response Surface Methodology (Central Composite Design and Doehlert Design), "Multicriteria Decision Making", D-Optimal Designs, Designs with qualitative variables having more than two levels, Mixture Designs, Mixture-Process Designs.

The school will be made by theoretical lessons and example illustrations, with hands-on-computer sessions in an R-based free software.

The number of seats is limited. **Contact us to know the availability before paying the registration fees.**
Course language: Italian.
The course will take place in Genoa; the classroom has not been defined yet.

http://www.difar.unige.it/images/Chimica_Analitica/DoE_depliant_May2019_first.pdf

2) **Analisi Esplorativa dei Dati**

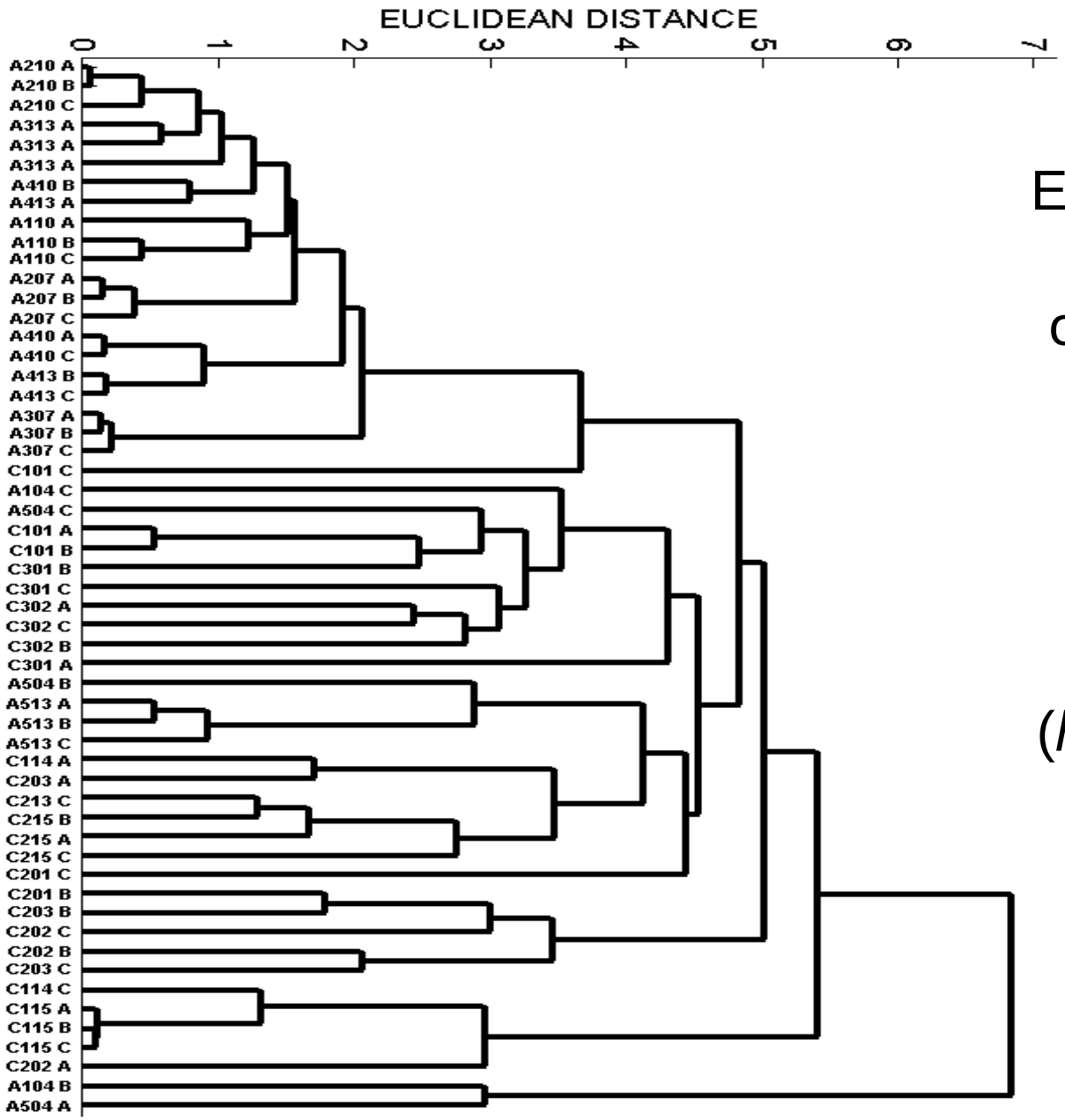
- Non ci è stato possibile progettare

Vogliamo:

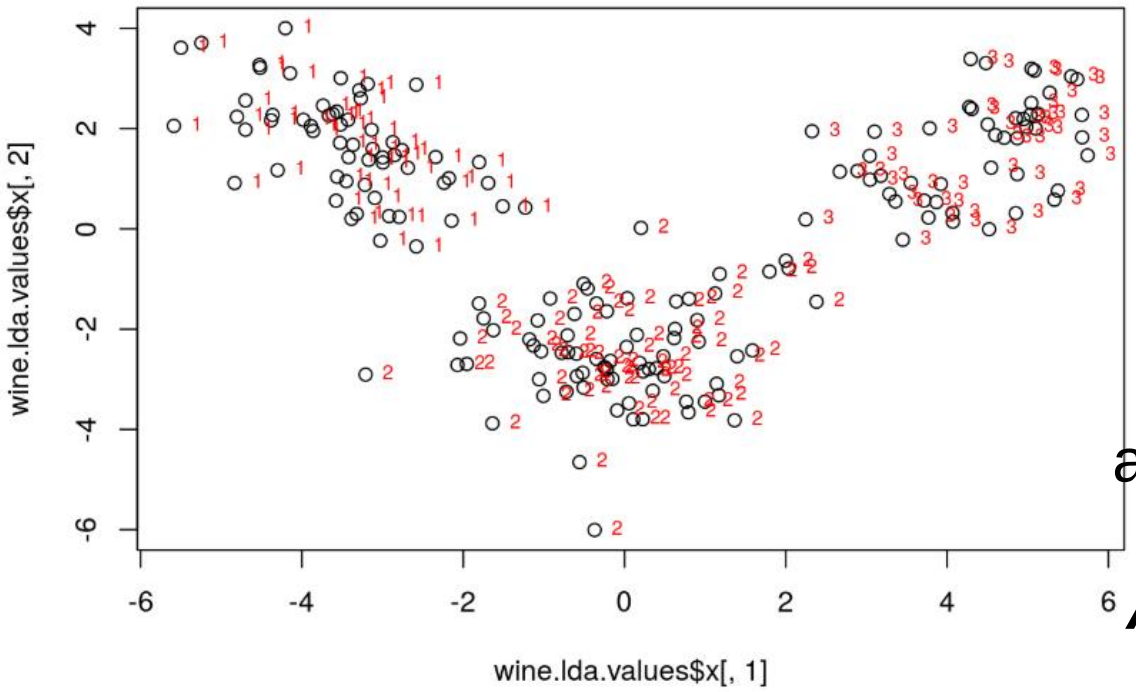
- Trovare strutture
- Trovare raggruppamenti
- Trovare dati anomali (outliers)

3) **Metodi di Classificazione**

- Ricerca di raggruppamenti (di campioni, molecole, etc.)= UNSUPERVISED classification
- I raggruppamenti sono noti = SUPERVISED classification
- Visualizzare i raggruppamenti
- Classificare
- Testare/validare la classificazione



Esempio di output di un'analisi di classificazione "non supervisionata": un dendrogramma di un'analisi di raggruppamento gerarchico (*hyerarchical cluster analysis*)



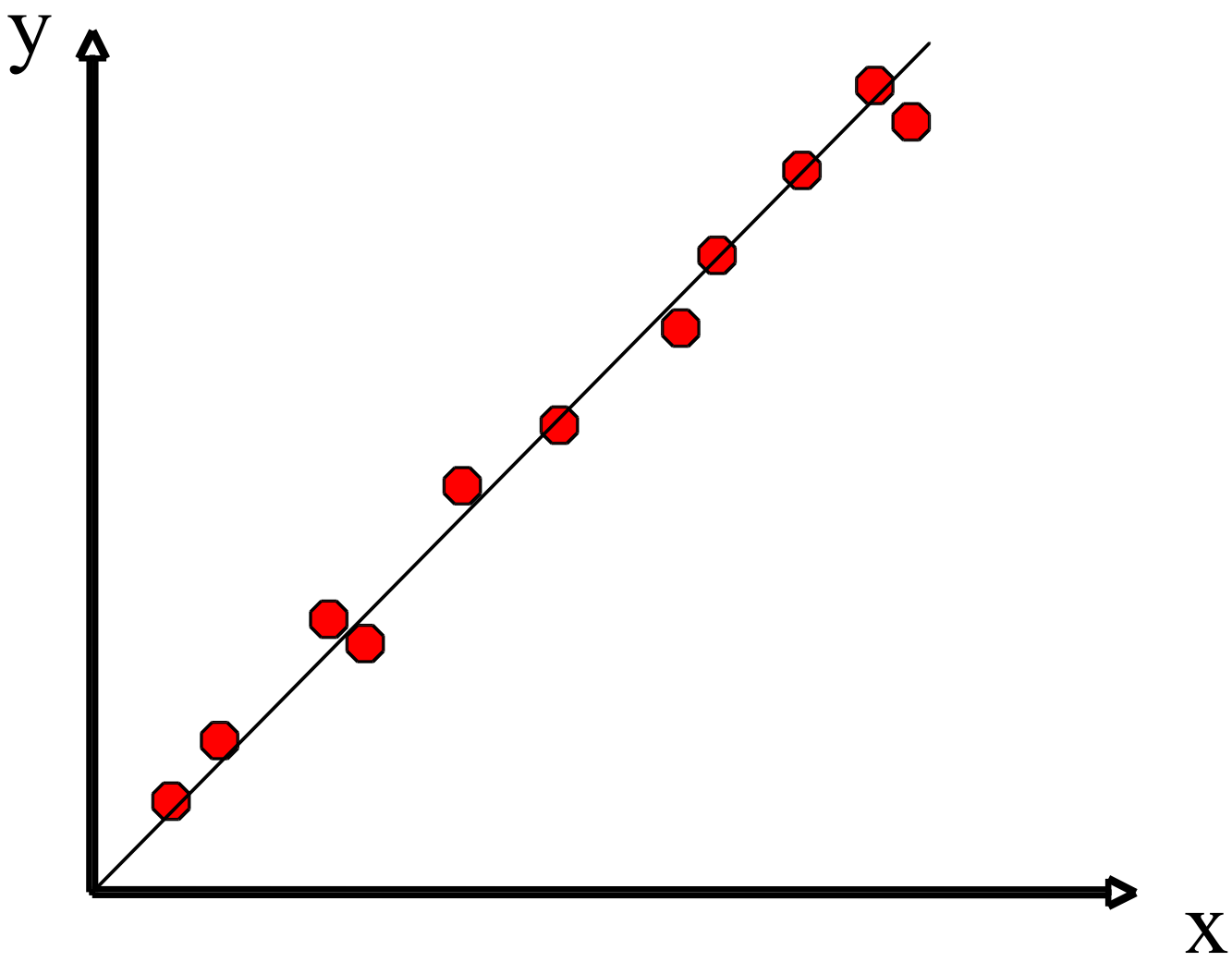
Esempio di output di un'analisi di classificazione "supervisionata": grafico di dispersione dei campioni di tre classi predeterminate (tre cultivar di vino) nello spazio definito dalla analisi discriminante lineare (***Linear Discriminant Analysis***) in base a Misure di etanolo, acido malico,ceneri, alcalinità, magnesio, fenoli, flavanoidi, non flavonoidi, proantocianine, colore, tonalità, prolina.

Metodi di Classificazione

https://rstudio-pubs-static.s3.amazonaws.com/35817_2552e05f1d4e4db8ba87b334101a43da.html

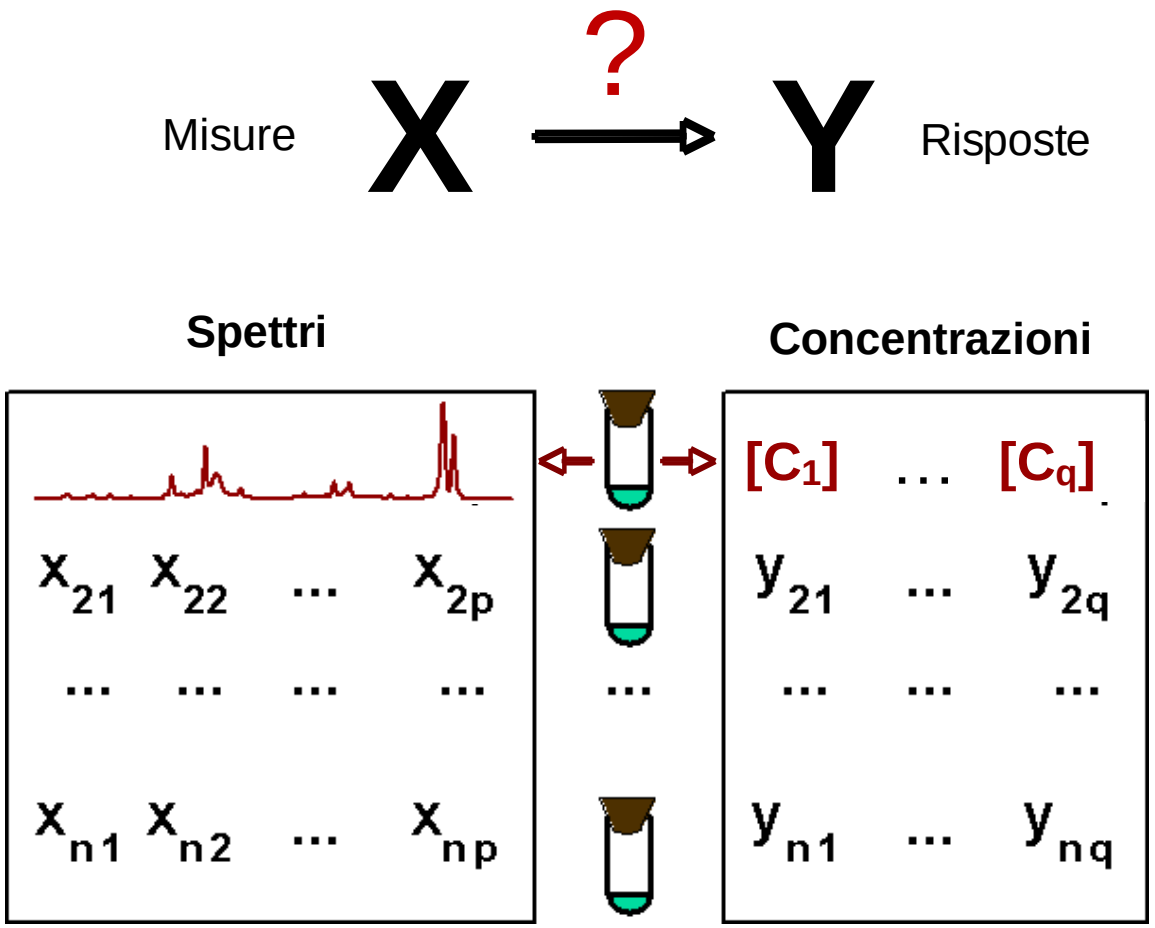
4) **Regressione / Calibrazione**

- Due tipi of variabili X / y
- Relazioni lineari / nonlineari
- Modelli
- Analisi diagnostica sulla bontà del modello



Regressione / Calibrazione

Calibrazione multivariata



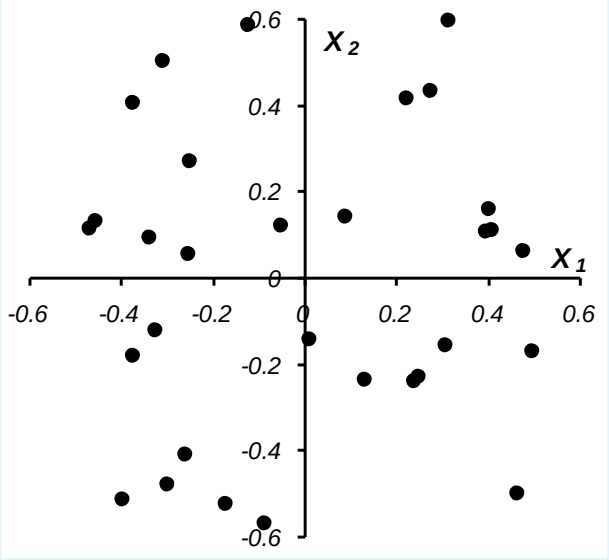
Regressione / Calibrazione

Un “*working horse*” per l’analisi esplorativa, la compressione dell’informazione e la visualizzazione di dati multivariati:

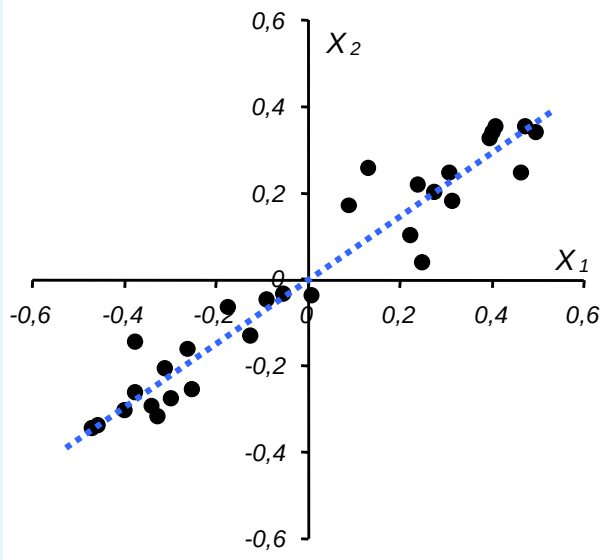
l’Analisi delle Componenti Principali (Principal Component Analysis - PCA)

Metodi di proiezione e variabili latenti

Dati senza struttura



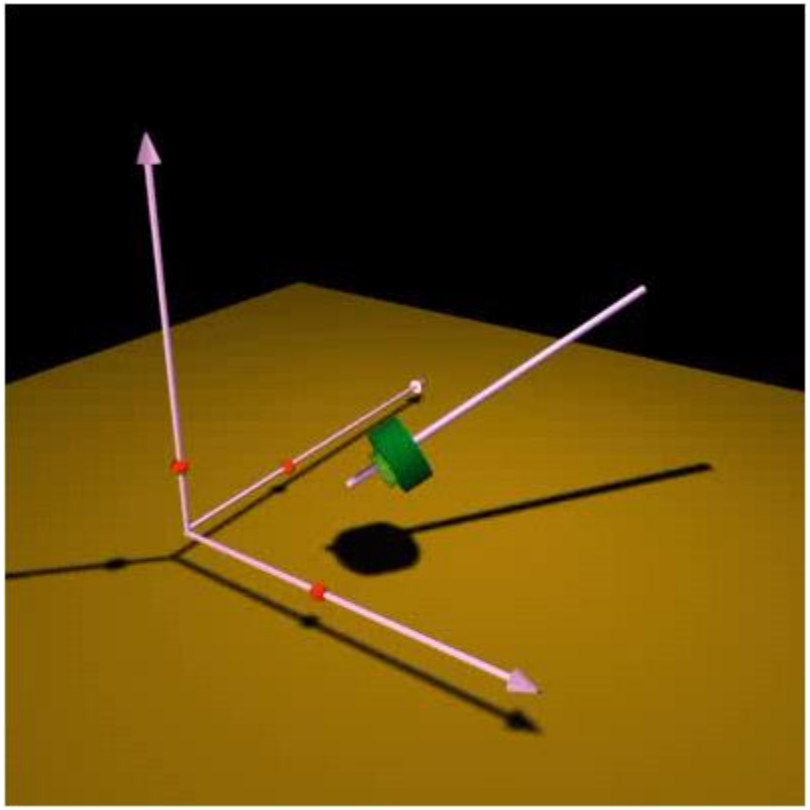
Dati con struttura nascosta



Metodi di proiezione e variabili latenti

Dimensioni formali – numero di variabili

Dimensioni effettive – numero di variabili latenti che coprono tutta la variabilità dei dati



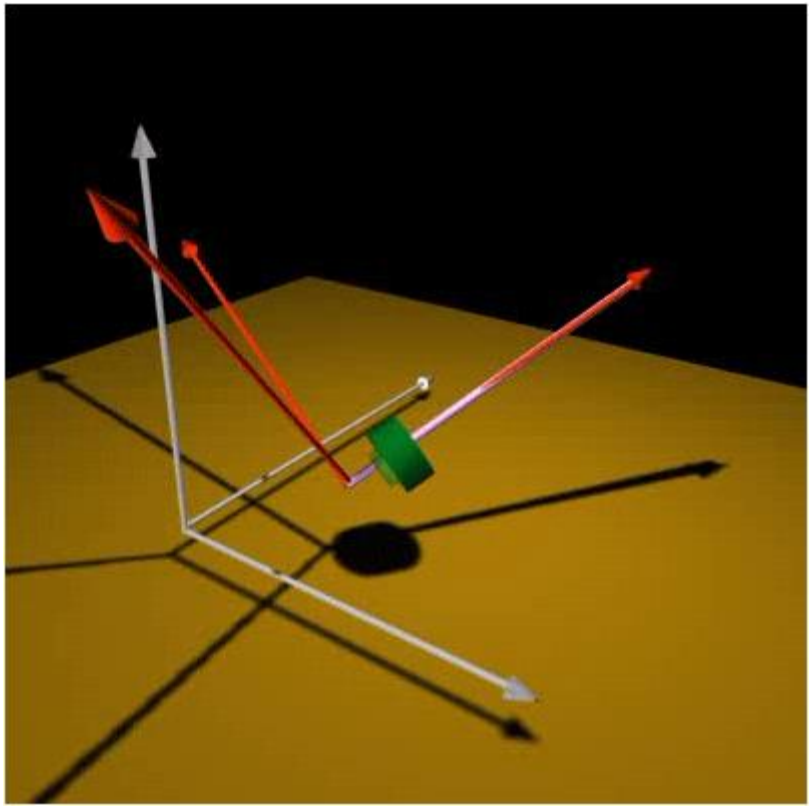
Dimensione formale = **3**

X_1	X_2	X_3
0,121	0,095	0,259
0,834	0,951	0,901
1,548	1,807	1,543
2,261	2,663	2,185
2,974	3,519	2,827
3,687	4,375	3,469
4,401	5,231	4,111
5,114	6,087	4,753
5,827	6,943	5,394

Metodi di proiezione e variabili latenti

Dimensioni formali – numero di variabili

Dimensioni effettive – numero di variabili latenti che coprono tutta la variabilità dei dati



Dimensione effettiva = **1**

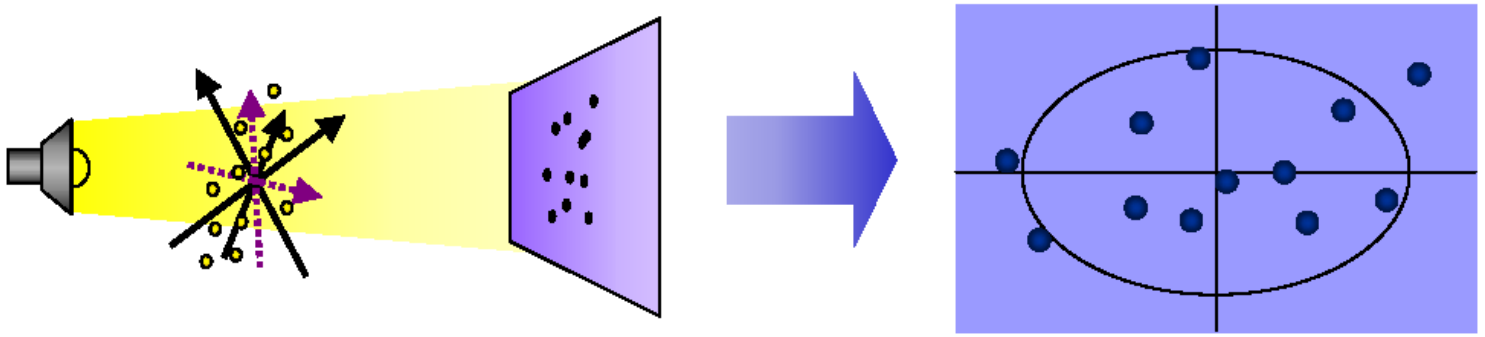
X_1'	X_2'	X_3'
0,1	0,0	0,0
0,2	0,0	0,0
0,3	0,0	0,0
0,4	0,0	0,0
0,5	0,0	0,0
0,6	0,0	0,0
0,7	0,0	0,0
0,8	0,0	0,0
0,9	0,0	0,0

Metodi di proiezione e variabili latenti

Proiezioni nel sottospazio delle variabili latenti

–Consente di ridurre la dimensionalità dei problemi

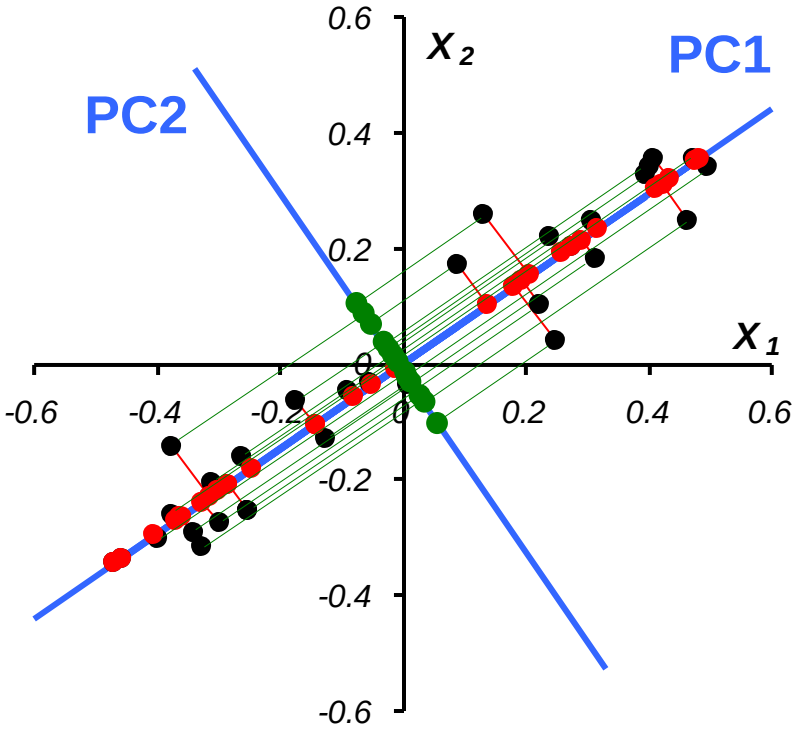
–Fornisce la possibilità di un'analisi visuale dei dati



Come trovare le variabili latenti?

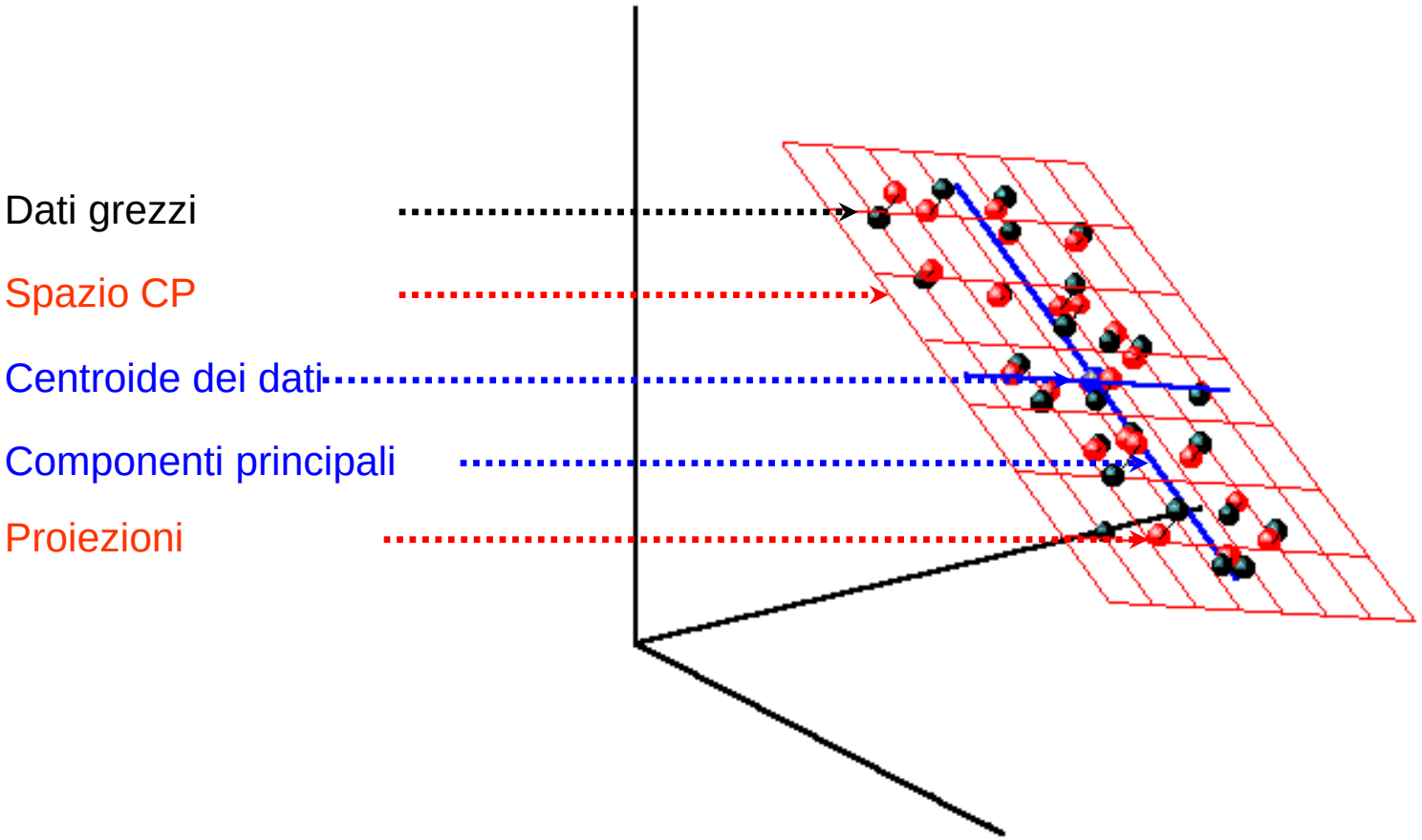
Spazio delle Componenti Principali

- Si individua la variabile latente – (prima **componente principale**, **PC1**) lungo la direzione di massima varianza
- Si proiettano tutti i campioni su **PC1**
- Rimane della **varianza residua**
  - considerata come noise/ rumore (informazione inutile)
  - modellabile con **PC2**

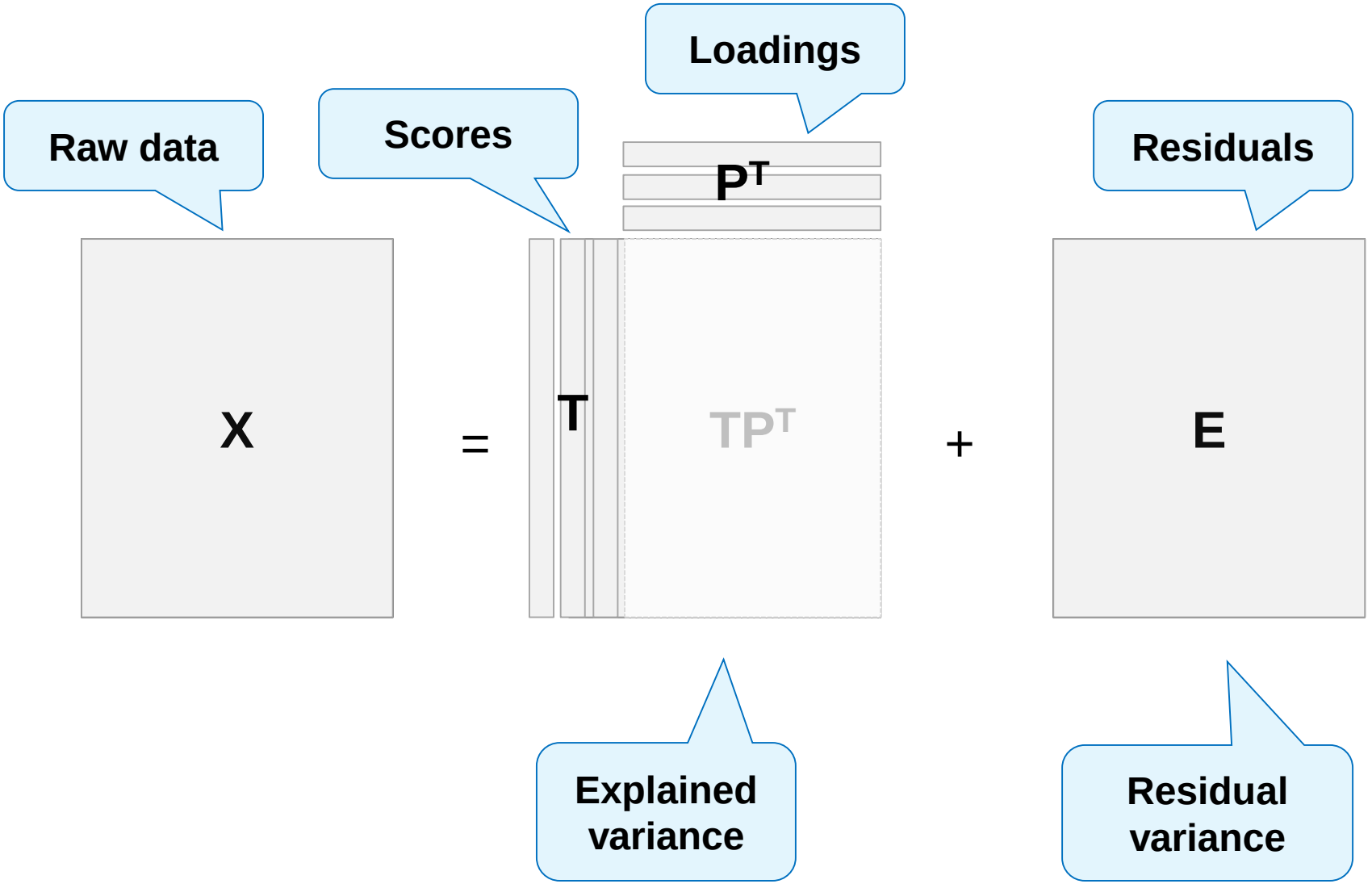


$$X_2 = aX_1 + E$$

Spazio delle Componenti Principali

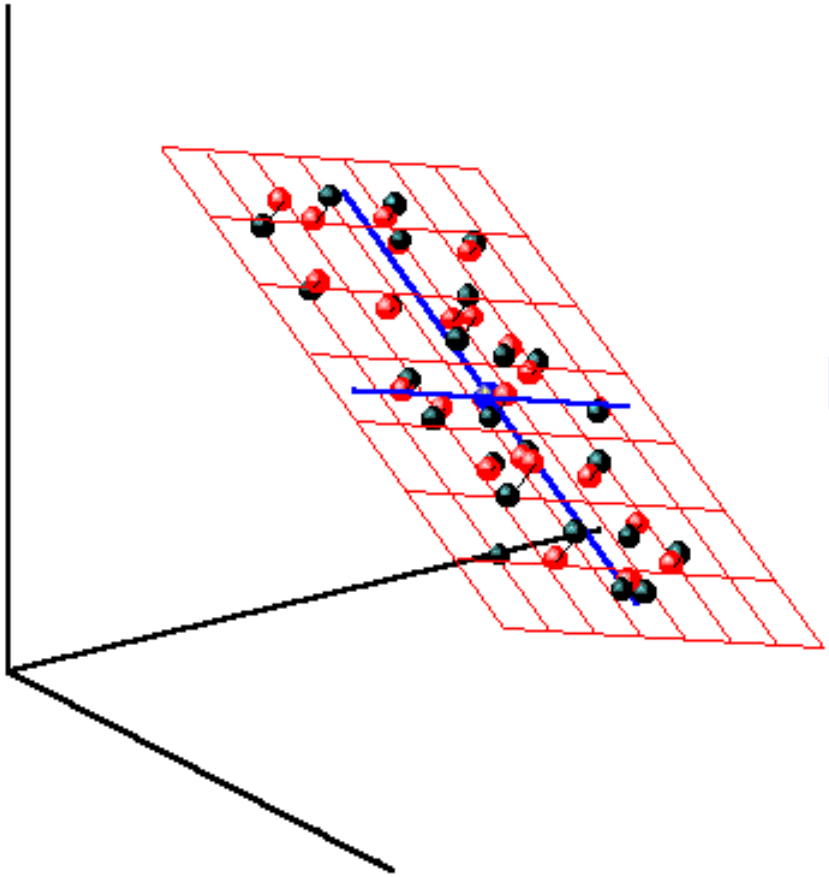


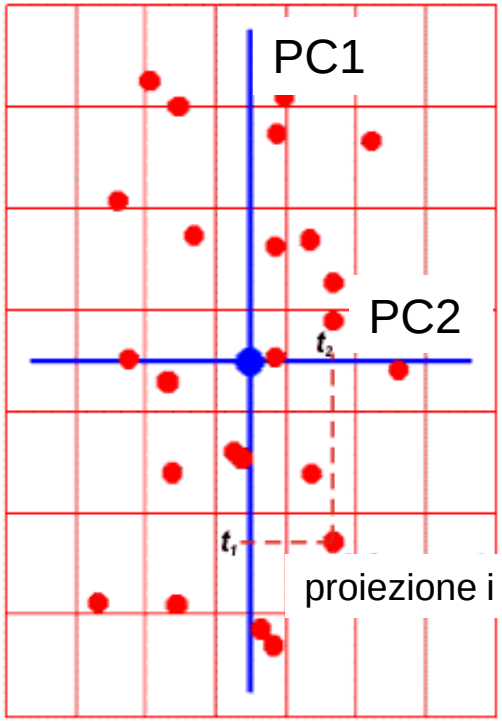
Analisi delle Componenti Principali



Punteggi (*scores*) nella PCA

$$X = TP^T + E$$





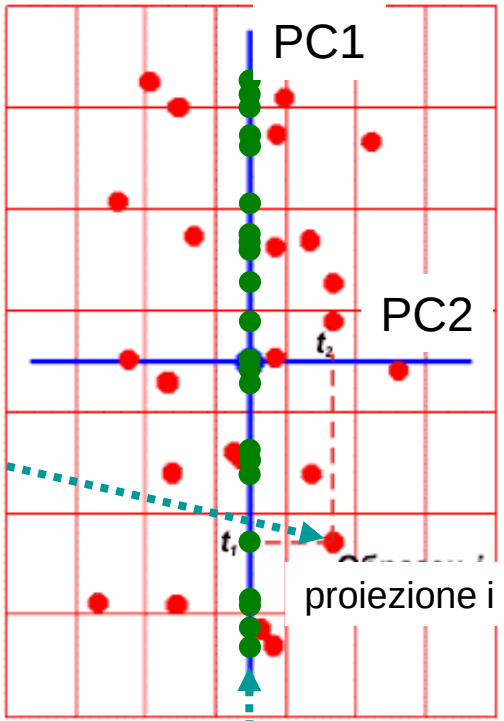
Punteggi (*scores*) nella PCA

$$X = TP^T + E$$

- **Righe** – coordinate del campione sulle componenti principali
- **Colonne** – proiezioni dei campioni sulla componente principale

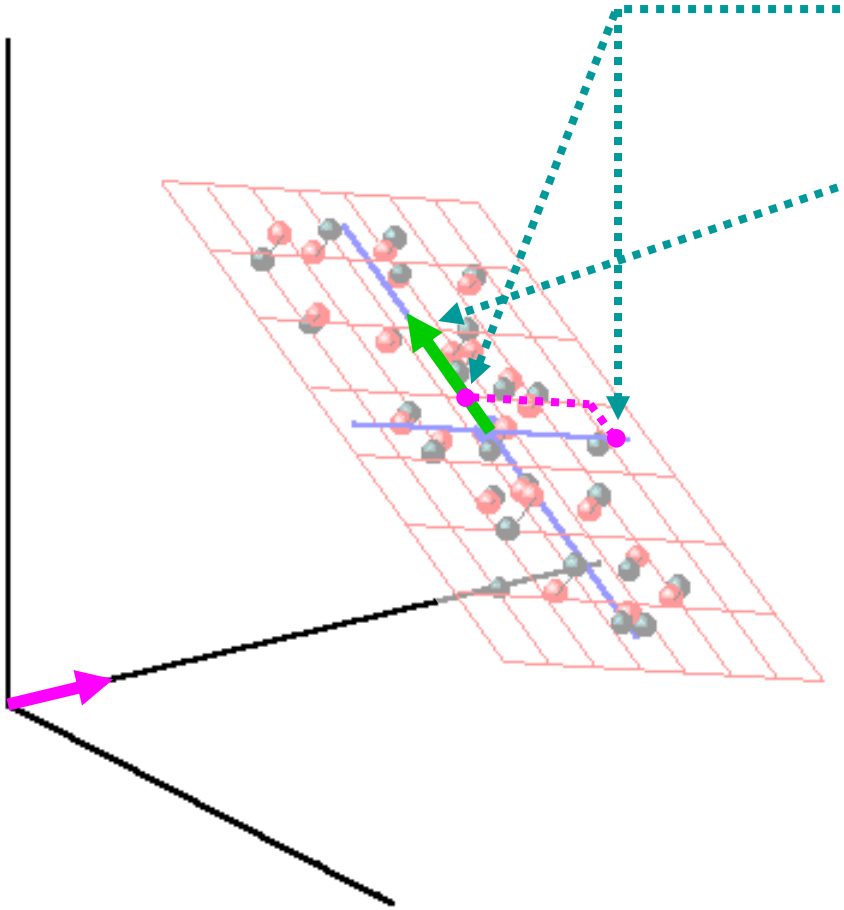
T

t_{11}	t_{12}
t_{21}	t_{22}
,	,
,	,
,	,
t_{i1}	t_{i2}
,	,
,	,
,	,
t_{n1}	t_{n2}



Pesi (*loadings*) nella PCA

$$X = TP^T + E$$



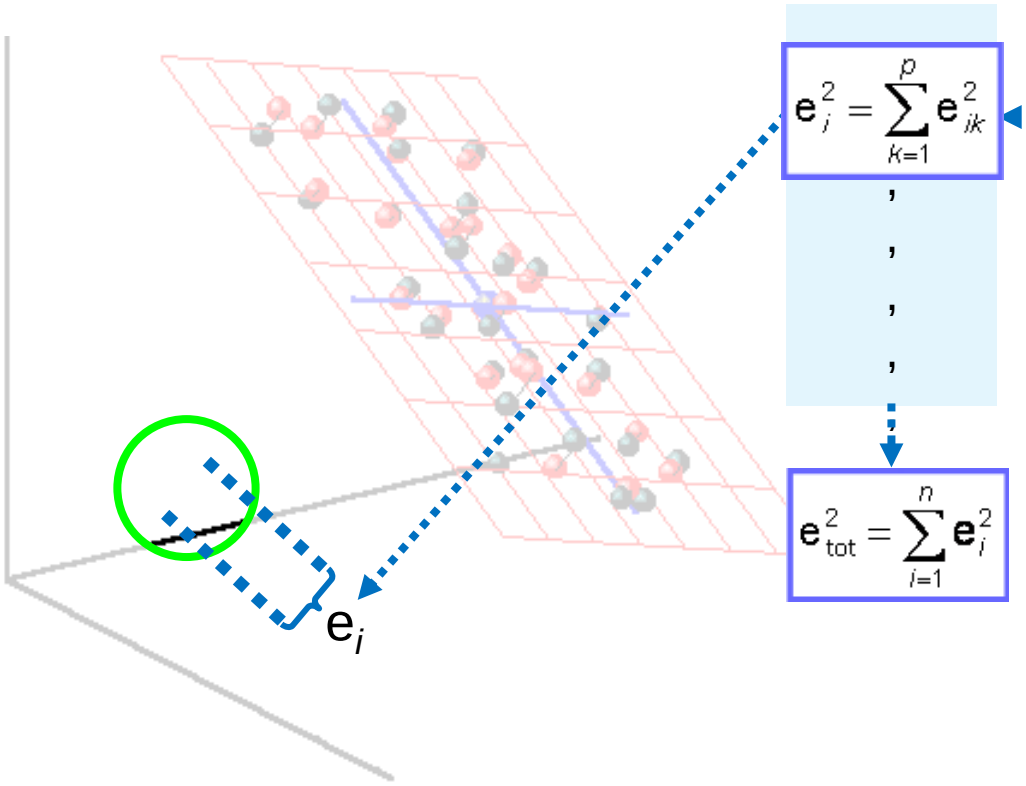
P^T

p_{11}	p_{11}	. . .	p_{1m}
p_{21}	p_{21}	. . .	p_{2m}

- **Righe** –vettori della base delle C.P. nello spazio delle variabili
- **Colonne** – proiezioni dei vettore di base delle variabili nello spazio delle C.P.

Matrice E,
variabilità non spiegata dal modello

$$X = TP^T + E$$



e_{11}	e_{12}	…	e_{1p}
e_{21}	e_{22}	…	e_{2p}
, , ,	, , ,	**E**	, , ,
e_{n1}	e_{n2}	…	e_{np}

- e_i – distanza tra il campione e lo spazio delle C.P.
- e^2_{tot} –varianza residua

L'Analisi delle Componenti Principali
è una particolare tecnica di Analisi Fattoriale

Variabili e fattori

- L'analisi fattoriale ha come obiettivo principale l'individuazione di pochi costrutti fattoriali in grado di sostituire un insieme di numerose variabili.
- I costrutti fattoriali vengono considerati, a loro volta, nuove variabili suscettibili di una appropriata interpretazione

Caratteristiche comuni ai metodi di estrazione dei fattori

- Si estraggono fattori (comunque fino a un massimo pari al numero di variabili) finché si ritiene che la varianza spiegata sia sufficientemente grande rispetto alla varianza totale.
- Qualunque metodo di estrazione deve fornire, per ciascuna variabile, un valore numerico (chiamato "saturazione" o "peso") che misuri l'importanza del legame tra variabile e fattore.

Misura del grado di rappresentatività dei fattori rispetto a una variabile

- Per ciascuna variabile è possibile calcolare la "comunalità", cioè la somma dei quadrati dei "pesi" dei fattori.
- La "comunalità" assume valori compresi fra 0 e 1: se è uguale a 1, la variabile può essere esattamente determinata dalla combinazione lineare dei fattori.
- L'interpretazione dei risultati viene facilitata dalla "rotazione" della tabella dei "pesi", operazione per la quale sono disponibili diverse tecniche

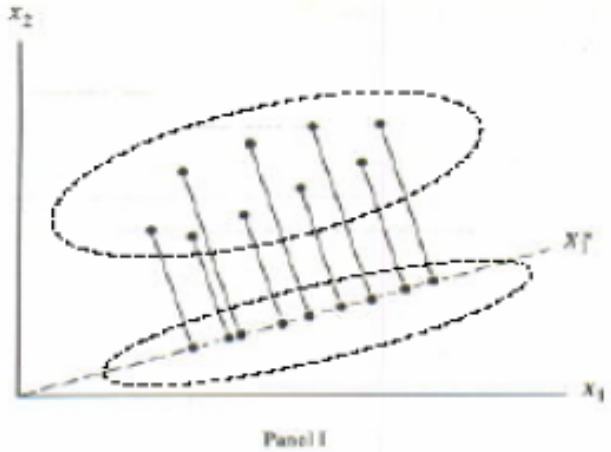
Analisi in componenti principali

L' Analisi in Componenti Principali (ACP) è una tecnica che a partire da un insieme di variabili quantitative (o al più binarie) osservate (originarie) $X_1, X_2, \ldots, X_j, \ldots, X_k$ produce un nuovo insieme di variabili artificiali $Y_1, Y_2, \ldots, Y_p$ ($p \leq k$) dove ciascuna Y_q (q=1,.. p) è una combinazione lineare di $X_1, X_2, \ldots, X_j, \ldots, X_k$

ACP da un punto di vista geometrico

- La matrice dei dati $\mathbf{X}_{n,k}$ è rappresentabile geometricamente come *n* punti in uno spazio R^k, cioè a *k* dimensioni
- Ciascuna riga della matrice $\mathbf{X}_{n,k}$ è chiamata vettore $\mathbf{x}_i=(\mathrm{x}_{i1}, \mathrm{x}_{i2}, \ldots, \mathrm{x}_{ik})$ costituito da *k* elementi numerici che rappresentano le coordinate cartesiane di un punto nello spazio di dimensione *k*
- L'ACP proietta gli *n* punti $\mathbf{x}_i$ rappresentabili nello spazio R^k in un sottospazio R^p di dimensione ridotta p<k individuato in modo tale che la "nuvola" degli *n* punti di R^k sia deformata il meno possibile

Qualità della riduzione



Panel I

Buona riduzione

Discriminazione tra le unità preservata

Panel II

Pessima riduzione

Formazione di cluster indesiderati

Procedura

Obiettivo: si vuole individuare il sottospazio di dimensione 1, e cioè una retta R^1, tale che la proiezione degli *n* punti $\mathbf{x}_i$ su di essa sia deformata il meno possibile

- Equivale a fare in modo che la varianza (l'inerzia) degli *n* punti $\mathbf{x}_i$ proiettati sulla retta sia la più grande possibile
- Le coordinate degli *n* punti-proiezione $\mathbf{y}_{i1}$ sulla retta costituiscono i valori della variabile artificiale Y_1 costruita dall'ACP: questa variabile è chiamata *prima componente principale* e tali valori sono le "osservazioni" di tale componente principale

Calcolo della prima componente principale

- Prima componente principale

$$y_{i1} = a_{11}x_{i1} + a_{21}x_{i2} + \ldots + a_{k1}x_{ik} = \sum_{j=1}^{k} a_{j1}x_{ij} \qquad i = 1,\ldots, n$$

- Problema: determinare i valori dei coefficienti a_{11}, $a_{21},\ldots,a_{k1}$ in modo tale che la varianza della variabile artificiale (componente principale) Y_1 sia massima e che la somma dei quadrati dei coefficienti sia =1

$$Var\,(Y_1) = \max$$

$$\sum_{j=1}^{k} a_{j1}^{2} = 1$$

Calcolo delle componenti principali successive

- Seconda componente principale

$$y_{i2} = a_{12} x_{i1} + a_{22} x_{i2} + \ldots + a_{k2} x_{ik} = \sum_{j=1}^{k} a_{j2} x_{ij} \qquad i = 1, \ldots, n$$

- Problema: determinare i valori dei coefficienti $a_{12}, a_{22}, \ldots, a_{k2}$ in modo tale che la varianza della variabile artificiale (componente principale) Y_2 sia massima, che la somma dei quadrati dei coefficienti sia =1 e che la comp.princ. Y_2 sia incorrelata con la comp.princ. Y_1

$$Var\,(Y_2) = \max$$

$$\sum_{j=1}^{k} a_{j2}^2 = 1$$

$$r(Y_1, Y_2) = 0 \Rightarrow a_{11} a_{12} + a_{21} a_{22} + \ldots + a_{k1} a_{k2} = 0$$

Proprietà delle componenti principali

- Ciascuna componente principale è una combinazione lineare delle variabili originarie
- La 1ª cp spiega il massimo della varianza (inerzia) spiegabile attraverso una riduzione ad una dimensione
- La 1ª componente e la 2ª componente principale spiegano il massimo della varianza spiegabile attraverso una riduzione a due dimensioni

.....

- La 1ª componente, la 2ª componente, ... la *p*-esima componente principale spiegano il massimo della varianza spiegabile attraverso una riduzione a *p* dimensioni

$$Var(Y_1) \geq Var(Y_2) \geq ... \geq Var(Y_p)$$

$$r(Y_t, Y_q) = 0 \qquad \forall t, q \text{ tale che } t \neq q$$

Risultati dell'ACP

- La risoluzione del problema di massimo vincolato ad ogni passo porta a trovare che
  - ✓Var(Y_1)= λ_1 primo autovalore della matrice S di var. e covar.
    Coefficienti $a_{11}, a_{21},\ldots,a_{k1}$ sono l'autovettore associato a λ_1
  - ✓Var(Y_2)= λ_2 secondo autovalore della matrice S
    Coefficienti $a_{12}, a_{22},\ldots,a_{k2}$ sono l'autovettore associato a λ_2
  - ✓Var(Y_3)= λ_3 terzo autovalore della matrice S
    Coefficienti $a_{13}, a_{23},\ldots,a_{k3}$ sono l'autovettore associato a λ_3
    .....
  - ✓Var(Y_p)= λ_p *p*-esimo autovalore della matrice S
    Coefficienti $a_{1p}, a_{2p},\ldots,a_{kp}$ sono l'autovettore associato a λ_p

$$Var(Y_1) \geq Var(Y_2) \geq \ldots \geq Var(Y_p) \Rightarrow \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_p$$

La matrice di correlazione R

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 1 & r_{12} & \cdots & r_{1k} \\ r_{21} & 1 & \cdots & r_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{k1} & r_{k2} & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

Le variabili vengono numerate da 1 a k, in modo che si potrà indicare con il simbolo r_{ij} il coefficiente di correlazione tra la variabile *i* e la variabile *j*. Data la simmetria del coefficiente di correlazione, si avrà $r_{ij} = r_{ji}$ (i, j = 1, ..., k)

Risultati dell'ACP applicata a variabili standardizzate

- Se si vuole lavorare su variabili standardizzate allora la procedura descritta deve essere applicata alla matrice **R** di correlazione
- La risoluzione del problema di massimo vincolato applicato alla matrice **R** ad ogni passo porta a trovare che
  - ✓Var(Y_1)= λ_1 primo autovalore della matrice **R** di correlazione
    Coefficienti $a_{11}, a_{21},\ldots,a_{k1}$ sono l'autovettore associato a λ_1
  - ✓Var(Y_2)= λ_2 secondo autovalore della matrice **R**
    Coefficienti $a_{12}, a_{22},\ldots,a_{k2}$ sono l'autovettore associato a λ_2
    .....
  - ✓Var(Y_p)= λ_p *p*-esimo autovalore della matrice **R**
    Coefficienti $a_{1p}, a_{2p},\ldots,a_{kp}$ sono l'autovettore associato a λ_p

$$Var(Y_1) \geq Var(Y_2) \geq \ldots \geq Var(Y_p) \Rightarrow \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_p$$

Le componenti principali sono fra loro incorrelate

Il modello ACP garantisce che le nuove variabili (le componenti principali) $Y_1, Y_2, \ldots, Y_p$ siano tra loro tutte non correlate

$$r(Y_t, Y_q) = 0 \qquad \forall t, q \text{ tale che } t \neq q$$

Obiettivi dell'analisi in componenti principali

- Riduzione delle k variabili osservate in un numero inferiore $p<k$ di nuove variabili sintetiche dette componenti principali tra loro incorrelate tali che spieghino il massimo della varianza totale della nuvola di punti originaria
- Eliminazione della correlazione esistente tra le k variabili originarie osservate sostituendo ad esse le componenti principali che sono incorrelate
- Costruire indici sintetici e variabili sintetiche

Criteri per la scelta del numero di componenti principali

Quante componenti principali scegliere?

- La scelta deve essere fatta in base a
  - ✓Criterio di parsimonia: numero minimo possibile di componenti principali
  - ✓Minima perdita di informazione
  - ✓Minima deformazione nella qualità della rappresentazione

Scelta del numero di componenti principali

- Criteri di scelta
  - ✓Percentuale di varianza (inerzia) spiegata dalle componenti principali almeno superiore al 70%

$$\frac{\lambda_1 + \lambda_2 + \ldots + \lambda_p}{\text{var}\,ianza\;\; totale} = \frac{\lambda_1 + \lambda_2 + \ldots + \lambda_p}{\sum_{j=1}^{k} \lambda_j}$$

  - ✓Analisi della rappresentazione grafica degli autovalori delle componenti in ordine decrescente: si può disegnare una spezzata unendo i punti corrispondenti agli autovalori per individuare più facilmente le componenti davvero importanti
  - ✓Componenti principali corrispondenti ad autovalori λ_q il cui valore
    - ✓ è maggiore dell'"inerzia" media $(\lambda_1 + \lambda_2 + \ldots + \lambda_k)/k$, OPPURE
    - ✓ è maggiore di 1 se nell'ACP si considerano le variabili standardizzate (analisi condotta sulla matrice di correlazione)

La matrice dei pesi (factor loading) delle componenti principali

- La *q*-esima componente principale Y_q è definita come la combinazione lineare delle variabili originarie $X_1, X_2, \ldots, X_j, \ldots, X_k$ con coefficienti $a_{1q}, a_{2q}, \ldots a_{jq}, \ldots, a_{kq} \Rightarrow$ il generico coefficiente a_{jq} rappresenta il peso che la variabile X_j ha nella determinazione della c.p. Y_q
  - ✓Valore assoluto di a_{jq} individua l'importanza della variabile X_j nella determinazione e spiegazione della cp Y_q
  - ✓Il segno (positivo o negativo) di a_{jq} fornisce indicazione della relazione esistente tra X_j e Y_q

Calcolo della comunalità di una variabile

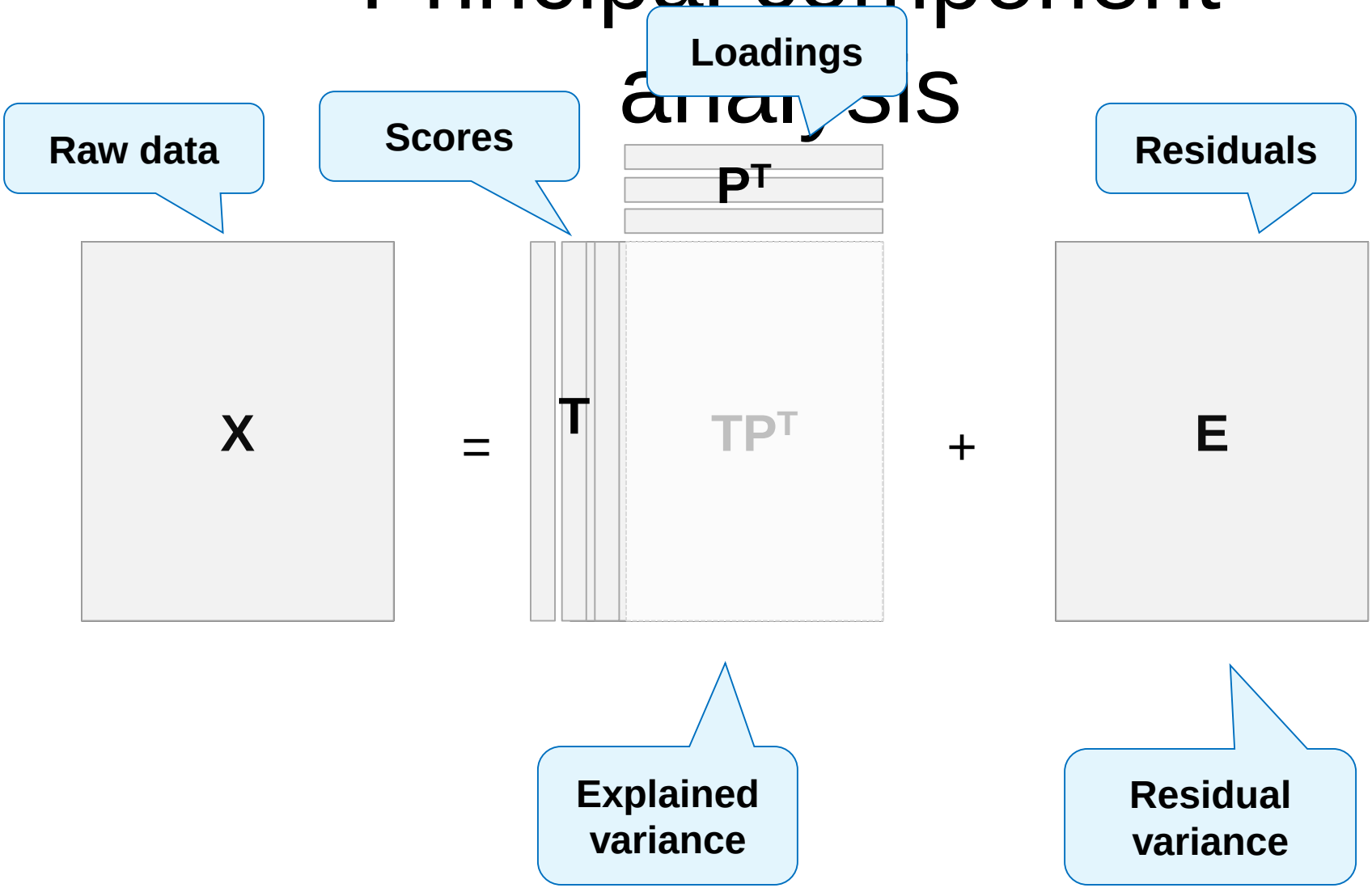
Assumendo p componenti principali, la comunalità della variabile X_j è:

$$h_j^2 = (a_{j1}\sqrt{\lambda_1})^2 + (a_{j2}\sqrt{\lambda_2})^2 + \ldots (a_{jp}\sqrt{\lambda_p})^2$$

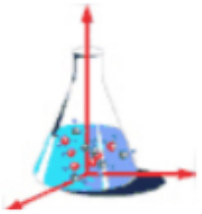
$$j = 1, 2, \ldots, k$$

La comunalità indica in quale misura le p componenti principali prescelte sono in grado di rappresentare ciascuna delle variabili originali.

Principal component analysis



Divisione di Chimica Analitica
Società Chimica Italiana



GRUPPO DIVISIONALE DI CHEMIOMETRIA

UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI GENOVA

The Research Group of Analytical Chemistry and Chemometrics, of the Department of Pharmacy of the University of Genoa organizes a SCHOOL OF MULTIVARIATE ANALYSIS (January 21-25, 2019).

Program:
21 January 10:00 – 13:00 (optional): basics of univariate statistics and introduction to Experimental Design.
21 January 14:00 – 25 January 13:00: Principal Component Analysis (with introduction to Multivariate Quality Control, Multivariate Process Monitoring and N-way methods), Cluster Analysis, Classification/Modeling methods (Linear Discriminant Analysis, Quadratic Discriminant Analysis, SIMCA), Multivariate Calibration (Multiple Linear Regression, Partial Least Squares).
The school will be made by theoretical lessons and hands-on-computer sessions on real data sets (free software will be used).

The number of seats is limited.
Course language: Italian.
The course will take place at the **Department of Economy, Aula Mandraccio, Via Vivaldi 5, 16126 GENOVA**.

- Analisi delle Componenti Principali con R

Francesca Marta Lilja Di Lascio

http://www2.stat.unibo.it/pillati/_doc/Comp_prin.pdf

Esercitazione

- Effettuare l'analisi delle componenti principali sul data set "olive oils"

Forina, Armanino, Lanteri, Tiscornia (1983) Classification of Olive Oils from their Fatty Acid Composition, in Martens and Russwurm (ed) Food Research and Data Anlysis.

Variabili :

region Three super-classes of Italy: North, South and the island of *Sardinia*

area Nine collection areas: three from North, four from South and 2 from Sardinia

palmitic, palmitoleic, stearic, oleic, linoleic, linolenic, arachidic, eicosenoic fatty acids percent x 100

FormatA 572 x 10 numeric array

- I calcoli verranno effettuati nell’ambiente di calcolo e visualizzazione statistica “R”, freeware, per Windows, Linux e Mac
- http://www.R-project.org/
- http://rm.mirror.garr.it/mirrors/CRAN/
- Scaricate ed installate R sul vostro PC