Revista de la Societat Catalana de Química, núm. **10** (2011), p. 55-62
Filial de l'Institut d'Estudis Catalans
DOI: 10.2436/20.2003.01.29 ISSN: 2013-9853 (ed. electrònica) ISSN: 1576-8961 (ed. impresa)
http://revistes.iec.cat/index.php/RSCQ

La informació física no específica: el *bestseller* de la quimiometria
Non-specific physical information: a chemometric bestseller

Michele Forina,* Monica Casale i Paolo Oliveri
Universitat de Gènova. Departament de Química i Tecnologia Farmacèutica i Alimentària

Conferència inaugural del IX Memorial Enric Casassas (IQS, Barcelona, 2 de desembre de 2009; text traduït pel doctor Xavier Tomàs)

Resum. En aquesta conferència, homenatge al professor Enric Casassas, el professor Forina exposa, de manera molt didàctica, tres idees importants a tenir presents per tots els que treballen en quimiometria o utilitzen tècniques quimiomètriques. L'objectiu sempre ha de ser resoldre una situació química real, tot procurant emprar eines de qualitat coneguda, i no cal tenir recança a aplicar-les a situacions com ara la informació física no específica.

Paraules clau: Quimiometria, informació física no específica, validació, procés analític, valors anòmals, selecció de variables.

Abstract. This lecture, a tribute to Prof. Enric Casassas, Prof. Forina presents in a very didactic way, three important ideas to take into account for all those who are working in chemometrics or use chemometric techniques. The main goal should always be to resolve a real chemistry situation, trying to use tools of known quality and we should not afraid to apply Chemometrics to situations such as non-specific physical information.

Keywords: Chemometrics, non-specific physical information, validation, analytical process, outliers, selection of variables.

Introducció

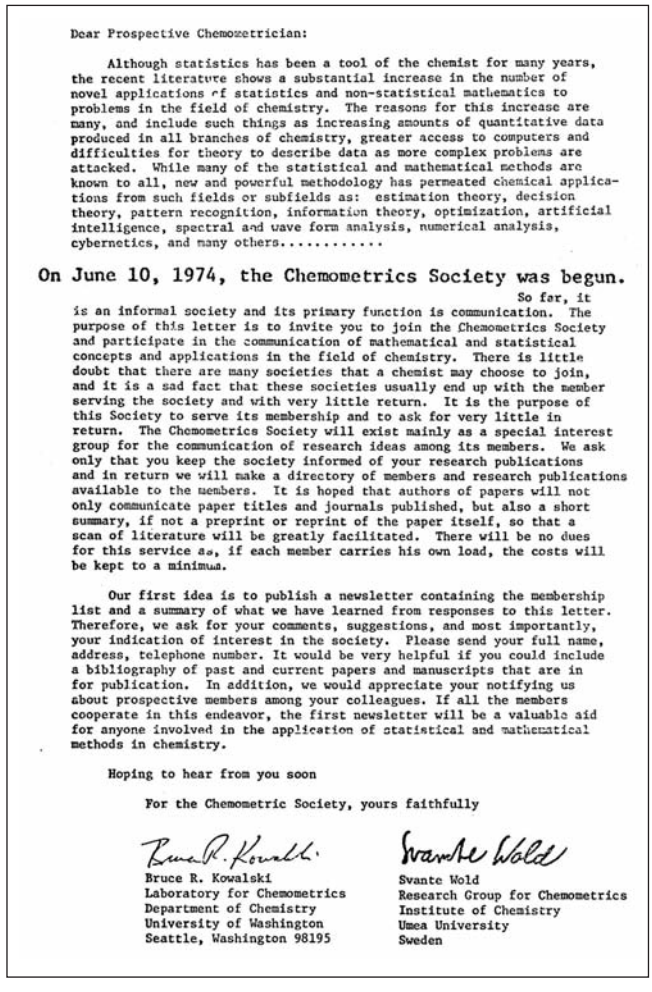
Fa aproximadament uns cinquanta anys, es va iniciar la quimiometria. La figura 1 mostra un fragment de la carta que Bruce Kowalski i Svante Wold, els fundadors de la Chemometrics Society, van enviar als químics interessats en l'aplicació de mètodes matemàtics i estadístics a la química, tot convidant-los a formar part de la nova societat.

En un principi, els quimiòmetres van emprar informació química o informació física reconeguda a bastament com a informació útil. El conjunt de dades ARCH,[1,2] que formava part del primer programari quimiomètric, ARTHUR, és un conjunt de dades de setanta-cinc mostres d'obsidiana provinents de quatre localitzacions properes a San Francisco, caracteritzades pel contingut en deu metalls. En el conjunt de dades KETONES, que formava part de la primera versió del programari SIMCA, es descriuen vint ciscetones i transcetones mitjançant set variables obtingudes de llurs espectres IV i UV, i que descriuen l'efecte del grup carbonil i del doble enllaç sobre l'absorbància.

Molt aviat, els quimiòmetres van començar a utilitzar informació física no específica.

Correspondència: Michele Forina. Università degli Studi di Genova. Dipartimento di Chimica e Tecnologie Farmaceutiche ed Alimentari
Via Brigata Salerno, 13. I-16147 Genova (Italia)
Tel.: +39 010 353 2630. Fax: +39 010 353 2684
A. e.: *forina@dictfa.unige.it*

Un cromatograma és exactament el registre d'un senyal físic no específic que esdevé informació química quan hom procedeix a assignar els pics cromatogràfics a compostos químics.



Dear Prospective Chemometrician:

Although statistics has been a tool of the chemist for many years, the recent literature shows a substantial increase in the number of novel applications of statistics and non-statistical mathematics to problems in the field of chemistry. The reasons for this increase are many, and include such things as increasing amounts of quantitative data produced in all branches of chemistry, greater access to computers and difficulties for theory to describe data as more complex problems are attacked. While many of the statistical and mathematical methods are known to all, new and powerful methodology has permeated chemical applications from such fields or subfields as: estimation theory, decision theory, pattern recognition, information theory, optimization, artificial intelligence, spectral and wave form analysis, numerical analysis, cybernetics, and many others.....

On June 10, 1974, the Chemometrics Society was begun.

So far, it is an informal society and its primary function is communication. The purpose of this letter is to invite you to join the Chemometrics Society and participate in the communication of mathematical and statistical concepts and applications in the field of chemistry. There is little doubt that there are many societies that a chemist may choose to join, and it is a sad fact that these societies usually end up with the member serving the society and with very little return. It is the purpose of this Society to serve its membership and to ask for very little in return. The Chemometrics Society will exist mainly as a special interest group for the communication of research ideas among its members. We ask only that you keep the society informed of your research publications and in return we will make a directory of members and research publications available to the members. It is hoped that authors of papers will not only communicate paper titles and journals published, but also a short summary, if not a preprint or reprint of the paper itself, so that a scan of literature will be greatly facilitated. There will be no dues for this service as, if each member carries his own load, the costs will be kept to a minimum.

Our first idea is to publish a newsletter containing the membership list and a summary of what we have learned from responses to this letter. Therefore, we ask for your comments, suggestions, and most importantly, your indication of interest in the society. Please send your full name, address, telephone number. It would be very helpful if you could include a bibliography of past and current papers and manuscripts that are in for publication. In addition, we would appreciate your notifying us about prospective members among your colleagues. If all the members cooperate in this endeavor, the first newsletter will be a valuable aid for anyone involved in the application of statistical and mathematical methods in chemistry.

Hoping to hear from you soon

For the Chemometric Society, yours faithfully

Bruce R. Kowalski
Laboratory for Chemometrics
Department of Chemistry
University of Washington
Seattle, Washington 98195

Svante Wold
Research Group for Chemometrics
Institute of Chemistry
Umea University
Sweden

FIGURA 1. El «certificat de naixement» de la Chemometrics Society.

Al seu torn, la informació química pot ser o no informació específica. La interpretació química d'un cromatograma pot esdevenir molt difícil, especialment en el cas dels cromatogrames complexos.

L'any 1978, Bruce Kowalski[3] va utilitzar cromatogrames d'espai de cap «cecs» en un estudi que tenia com a objectiu la caracterització de marques de whisky. Com que l'objectiu de l'estudi no era augmentar els coneixements químics, la interpretació química dels diferents pics cromatogràfics no era, en conseqüència, necessària.

Fonts d'informació física no específica

Avui dia, la quimiometria s'aplica amb molta freqüència a l'estudi d'informació física no específica provinent de diferents àmbits. Per a cada mostra, els instruments proporcionen milers (en ocasions, milions) de variables, no totes necessàriament útils. L'objectiu és, doncs, obtenir la informació útil per resoldre tant problemes de classificació com problemes de regressió. Els sectors d'aplicació més importants són el control de qualitat, el control de processos, la traçabilitat dels aliments i la metabolòmica.

Les fonts d'informació física més emprades són l'absorció o la reflectància dels espectres electromagnètics (com el visible, l'ultraviolat, l'infraroig, els raigs X, la fluorescència i el Raman), els espectres de masses (com ara els obtinguts per un «nas artificial»), la potenciometria (dades obtingudes per un conjunt d'elèctrodes), la voltametria (com és el cas d'algunes «llengües artificials»), els espectres de ressonància magnètica nuclear, els diversos tipus de cromatografia, etc.

La informació física que hom pot obtenir d'una mostra pot ser un vector (com ara l'espectre obtingut d'una mostra de composició uniforme), una matriu bidimensional (com és el cas d'un espectre Raman) o també una matriu tridimensional (com és el cas d'una imatge).

Al seu torn, cada tipus de senyal pot correspondre a una informació molt diferent segons les característiques de l'instrument de mesura o els tractaments especials de les dades originals. A tall d'exemple, l'espectre obtingut per espectroscòpia en l'infraroig proper (NIRS) depèn molt de la sonda emprada, dels tipus de senyal mesurats (absorció, reflectància, transreflectància), de l'entorn físic de la mostra (com és el cas del NIR en dues dimensions, en el qual s'aplica una tensió de petita amplitud a la mostra, la qual cosa provoca una fluctuació dinàmica dels senyals IR) i de la mateixa font (com ara en TOF–NIRS, on la font és un làser de polsos).

Segons el tipus de tractament (derivades, eliminació de tendències, transformada de Fourier, etc.), la informació física pot donar resultats molt diferents. És més: a vegades, és possible combinar la informació obtinguda amb diferents instruments amb uns resultats excel·lents.[4]

Entre les diferents fonts d'informació física no específica, l'espectroscòpia d'infraroig proper (NIR) és avui la tècnica líder en control de qualitat tant del producte final com dels productes intermedis i de les matèries primeres. Això vol dir que milers de químics i tècnics utilitzen la tècnica NIR cada dia fent milions de determinacions. Per aquesta raó, l'espectroscòpia NIR és un *bestseller* de la quimiometria.

La imatge de la quimiometria no és la pròpia dels quimiòmetres, la de les poques persones que fan servir mètodes de quimiometria avançada i publiquen articles d'alta qualitat, tot i que molt difícils de comprendre per a la majoria dels químics. La imatge pública de la quimiometria és la que presenten els *bestsellers* a la gran majoria dels químics. En dir *bestseller*, ens referim simplement a un producte amb una circulació molt gran, malgrat que no que tingui necessàriament una gran qualitat. La qualitat final d'un *bestseller* pot ser pobra o, si més no, limitada.

Normalment, els químics que fan servir l'espectroscòpia NIR en control de qualitat utilitzen el programari subministrat pels fabricants dels instruments com si fos una «caixa negra». En general, aquest programari té una qualitat bona o almenys acceptable, però sempre ha estat dissenyat com una eina senzilla per ser emprada per persones sense coneixements d'estadística elemental ni de quimiometria. Per aquesta raó, juntament amb els instruments i el programari, s'acostumen a proporcionar unes «regles d'or» que els usuaris segueixen després fil per randa.

La qualitat dels *bestsellers* quimiomètrics

A continuació presentarem uns pocs exemples de la qualitat dels nostres *bestsellers*. Tots els exemples fan referència a l'ús de l'espectroscòpia NIR. Seguint l'esperit de la dita popular, farem esment del pecat, però no del pecador.

Exemple 1

En una conferència, un dels ponents va dir: «En el cas del potassi, el de variància en validació creuada explicada va ser del 7 %. No és gaire, però sí que és *prometedor*».

Q^2, és a dir, el de variància explicada en validació creuada, s'utilitza amb molta freqüència en la presentació de resultats NIR quan hom aplica un calibratge multivariat. Q^2 és un paràmetre enganyós respecte al paràmetre d'interès, la desviació estàndard de l'error en predicció (SDEP) amb la qual es relaciona mitjançant la funció quadràtica inversa:

$$\frac{SDEP}{s_b} = \sqrt{1 - Q^2/100}$$

Aquí, s_b és la desviació estàndard abans de la regressió o desviació estàndard sense model, calculada a partir de les diferències entre els valors de la variable resposta i la mitjana de les respostes.

La figura 2 mostra com un valor igual a 7 de Q^2 correspon a un valor de SDEP pràcticament igual a la desviació estàndard abans de la regressió. Aquest valor es deu a una petita correlació (no significativa i fortuïta) entre el potassi i l'espècie química, que té un efecte sobre l'espectre NIR. No hi ha res de prometedor en aquest valor tan petit.

Però fins i tot valors grans de Q^2 no indiquen necessàriament que s'hagin obtingut bons resultats. Un valor de Q^2 igual a 50 vol dir que SDEP és aproximadament igual a 0,7 vegades la desviació estàndard abans de la regressió. Aquesta és una quantitat experimental, una estimació del valor real de σ que ens és desconegut.

Ara bé:

$$\frac{SDEP^2}{\sigma^2} = \nu$$

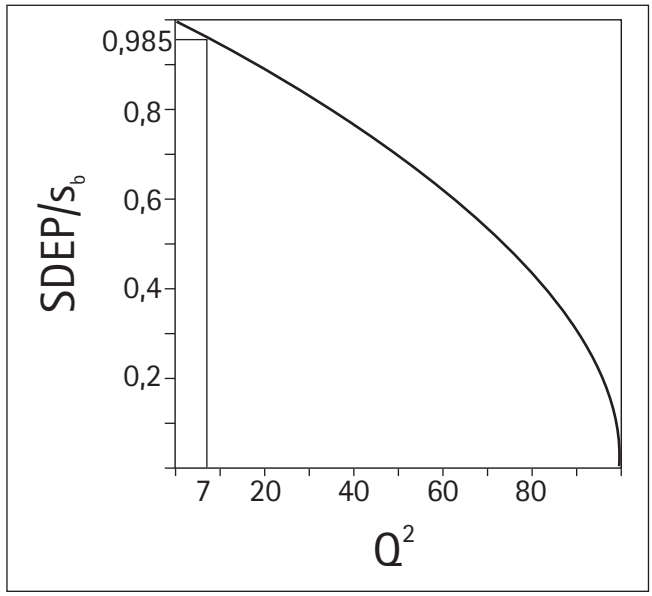


Figura 2. Relació de Q^2 i el quocient entre la desviació estàndard de l'error en predicció (SDEP o SEP) i la desviació estàndard abans de la regressió.

Això es distribueix com una variable χ^2 amb ν graus de llibertat, sent *n* el nombre de mostres emprades per a la validació. L'interval de confiança de σ^2 s'obté a partir dels valors crítics de la distribució de χ^2. Així, per $\nu = 20$, l'interval de confiança al 95 % és aproximadament $\pm$ 35 %, la qual cosa vol dir que el model de calibratge es pot comportar pitjor (o també millor) del que s'esperaria del valor de la SDEP obtinguda.

Ho sento pels estadistes, però Svante Wold, un dels fundadors de la quimiometria, va escriure el següent:[5]

Si nosaltres, erròniament, considerem la filosofia de l'estadística més sòlida que la de la química, prendrem el trist i desafortunat camí de la biometria, la psicometria... que avui són de poc o cap interès per als biòlegs, els psicòlegs... Aquesta desgràcia és la conseqüència de considerar més important el «rigor» matemàtic i estadístic que no pas el fet de resoldre els problemes científics. Naturalment, sempre s'ha de ser tan rigorós com sigui possible, però aquest rigor no ha de ser un rigor mortis*; el primer de tot sempre és el sentit químic.*

Ara bé, això també vol dir que quasi sempre és necessari un mínim coneixement i ús de l'estadística bàsica.

Exemple 2

Generalment, l'índex de maduració de les pomes, un paràmetre molt important per a un bon producte després del seu em-

magatzematge, es determina mitjançant la prova de iode i midó. Seguidament, un grup d'experts avalua la coloració obtinguda amb el reactiu en una zona de la poma com una puntuació en una escala sensorial. Els resultats no acostumen a ésser satisfactoris a causa del caràcter subjectiu de l'avaluació i de la seva gran dispersió.

Per aquestes raons, un equip d'investigadors va desenvolupar un model objectiu seguint l'esquema que es mostra a la figura 3 i van fer la prova sobre unes dues mil pomes.

Els científics van construir el model PLS amb prop de cent mil variables predictores (les reflectàncies dels píxels de les imatges NIR obtingudes per a cada mostra) i, com a resposta, les corresponents puntuacions atorgades a les mostres per l'equip d'experts. Els resultats no van ser satisfactoris, més o menys equivalents als obtinguts per l'equip de tastadors.

Malgrat tot, es va continuar l'estudi, la qual cosa significa més pomes, més experts, instruments amb un interval de longituds d'ona més ampli, imatges més grans i, en conseqüència, més diners.

Sembla com si les persones que treballen amb la quimiometria, a la pràctica, ignoressin que un model de calibratge mai no pot tenir una qualitat superior a la que tenen les respostes que s'han mesurat (en aquest cas, les puntuacions sensorials) i que s'han emprat per construir el model.

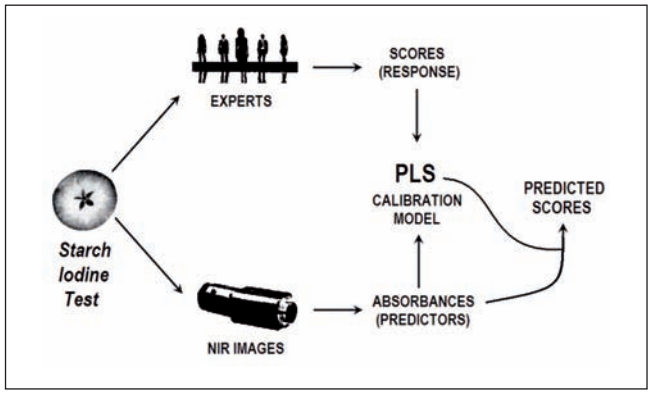


FIGURA 3. Esquema de calibratge emprat per a l'índex de maduració de les pomes.

Exemple 3

Una nova tècnica instrumental, TOF–NIR (temps de vol–NIR), es va aplicar a la determinació de sucres en fruites de pell gruixuda. El model es va construir sobre unes cent mostres i la SDEP resultant va ser del 0,22 %. Aquest va ser un resultat esplèndid, gairebé increïble, ja que aquesta precisió és molt poc freqüent en les anàlisis.

Si analitzem els resultats de la predicció que es mostren a la figura 4, observem que:

a) La resposta està expressada en percentatge de sucre. Això implica que el valor indicat de la SDEP és una desviació absoluta, no relativa.
b) L'interval d'error correspon aproximadament al 70 % de l'error de les variables resposta, aproximadament 1,4, és a dir, del 9 % al 10,4 %. La precisió de la tècnica no és pas per entusiasmar-se.

Ara bé, també podríem emprar un model alternatiu. Aquest model es desenvoluparia de la manera següent:

$$y_i^{\text{PREDITA}} = \frac{\sum_{j \neq i} y_j^{\text{MESURADA}}}{N - 1}$$

Aquí, *y* és la variable resposta mesurada o predita. El valor predit de la mostra *i* s'obté a partir de la resposta mesurada en les altres N – 1 mostres, és a dir, el model està construït en validació «total». Aquest model té una SDEP igual a 0,28 %, que no difereix significativament del valor 0,22 % obtingut per TOF–NIR. Aquest model, però, és molt més econòmic, ja que no necessita instruments.

Fem servir aquesta ironia per mostrar que amb massa freqüència s'utilitza un munt de treball i de diners per desenvolupar mètodes inútils i llurs resultats es presenten de manera enganyosa.

Validació «total» és allò que els quimiòmetres denominen *validació un a un* (LOOV). En aquest cas, el model s'avalua tantes vegades com mostres es deixen fora, cada vegada una d'elles. S'utilitza, doncs, el model per predir el valor de la resposta (o de la categoria) de la mostra que ha estat exclosa. Els resultats obtinguts amb la validació LOOV es consideren generalment massa optimistes i molts consideren que és preferible subdividir el conjunt en grups (entre tres i set) i calcular el model tantes vegades com grups s'han definit.

La capacitat de predicció s'obté cada vegada amb el model aplicat a la mostra del grup que s'ha exclòs. Aquest procediment es coneix amb el nom de *validació creuada* (CV).

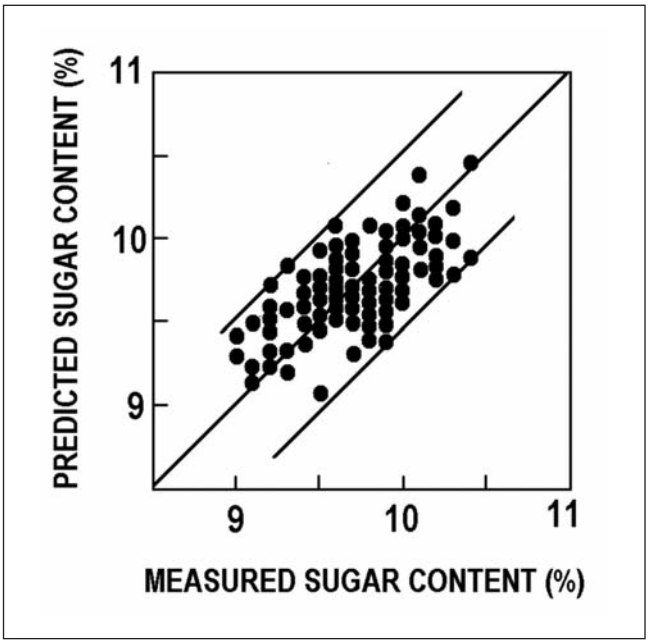


FIGURA 4. Predicció de sucre mitjançant TOF-NIRS.

La quimiometria i el procés químic analític

La majoria dels químics considera la quimiometria simplement com un conjunt d'eines per a l'anàlisi de les dades, just al final del procés de l'anàlisi química. Al contrari, la quimiometria és present en totes les etapes del procés analític (figura 5).

Aquest procés es duu a terme per tal d'obtenir la informació química o física (però relacionada amb la composició química) necessària d'un problema (si és possible, d'un problema real).

La quimiometria és molt més que tot això i ha de ser emprada en cadascuna de les etapes del procés.

La quimiometria ajuda a clarificar els objectius del procés, a definir el problema. La quimiometria és necessària a l'hora de preparar el disseny del pla de mostreig, és a dir, de recollir mostres representatives de totes les fonts de variació del sistema objecte del procés, possiblement, de la manera més econòmica que es pugui. Molt sovint, a la pràctica, les mostres no són gaire representatives, però les seves característiques poques vegades es discuteixen. Les tècniques quimiomètriques són útils per optimitzar les tècniques de mesura, i a la fi del procés són eines per a l'anàlisi de les dades, per extreure de

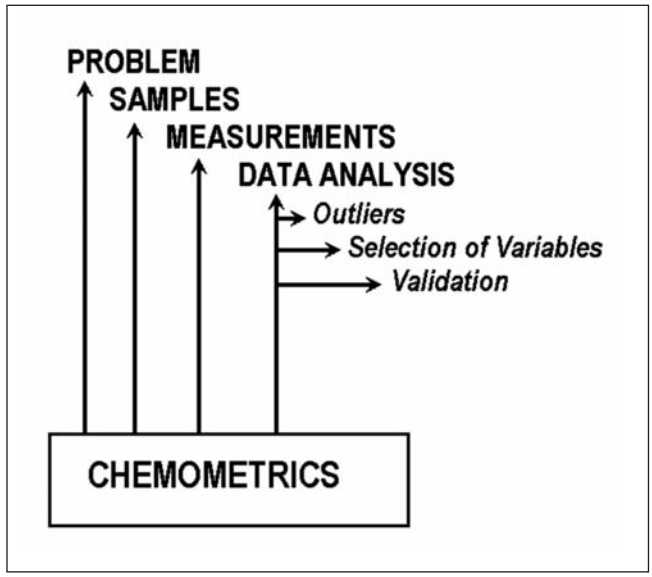


FIGURA 5. La quimiometria i el procés d'anàlisi química.

les dades originals la informació útil per als objectius del problema. Cada un d'aquests aspectes constitueix un ampli capítol de la quimiometria.

En referència a l'anàlisi de les dades, hi ha punts concrets on no és recomanable aplicar les «regles d'or» de manera automàtica.

Valors anòmals, outliers

Els valors anòmals es defineixen com a objectes (mostres) que tenen unes característiques molt diferents a la resta dels objectes del problema. Una bona pràctica, generalment admesa, consisteix a eliminar aquests valors anòmals. El guany segur és que, tant en problemes de classificació com de calibratge, després de l'eliminació, el model proposat funcionarà millor.

En el cas de l'anàlisi exploratòria de dades o en problemes de classificació, l'eliminació dels valors anòmals es realitza mitjançant la prova de Hotelling (prova multivariada anàloga a la prova de Student), que implica el compliment de la hipòtesi que totes les variables es distribueixen segons una llei normal, una circumstància que molt poques vegades es compleix quan hom treballa amb dades reals. En el cas dels problemes de regressió, els valors anòmals són també la causa per la qual l'error en predicció és molt gran.

Provaré d'explicar el que pot passar amb l'eliminació a cegues dels valors anòmals amb un exemple que no és químic.

La figura 6 mostra el resultat després d'analitzar la informació, detectar el valor anòmal i eliminar-lo.

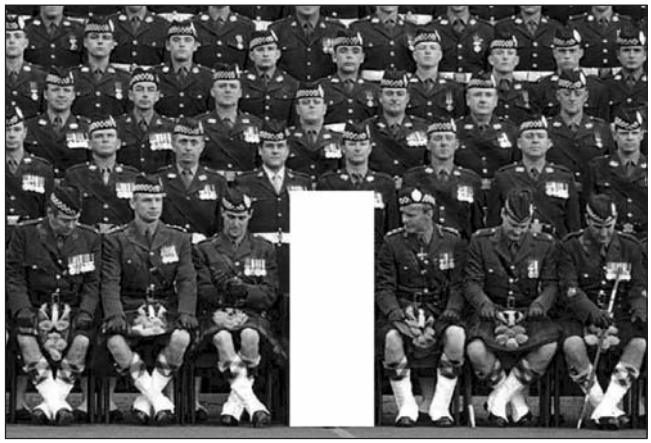


FIGURA 6. La informació després d'haver eliminat el valor anòmal.

Pel que fa a la identificació del valor anòmal, és evident que una part de la informació és redundant i, per tant, es pot eliminar. La figura 7 mostra la informació un cop eliminada la informació redundant.

FIGURA 7. La informació un cop s'ha eliminat la part redundant a l'hora de detectar el valor anòmal.

La figura 8 mostra el valor anòmal a l'espai de la informació reduïda, mentre que la figura 9 mostra el valor anòmal a l'espai de la informació original.

FIGURA 8. El valor anòmal a l'espai de la informació reduïda.

Aquest exemple posa de manifest que el valor anòmal pot ser molt important a l'hora de comprendre les dades i que l'eliminació d'informació pot ser útil només en aparença.

Selecció de variables

Quan hom treballa amb informació no específica, gairebé sempre una part de la informació no és útil, la qual cosa anomenem *soroll*. S'ha demostrat que l'eliminació d'aquesta informació soroll millora la qualitat dels models de classificació o de calibratge.

FIGURA 9. El valor anòmal a l'espai de la informació original.

Hi ha una gran quantitat de tècniques per a l'eliminació de variables predictores inútils. En el cas dels problemes de classificació, la tècnica més important és l'anàlisi discriminant lineal per etapes (SLDA).

Pel que fa als problemes de calibratge, s'ha desenvolupat una gran quantitat de tècniques que van des de la coneguda regressió per mínims quadrats pas a pas fins a l'aplicació d'algorismes genètics.

Els resultats següents fan referència a un problema de classificació amb tres classes i seixanta objectes disponibles per tal de construir un model de classificació (conjunt de dades FAN). El nombre de variables va ser d'un miler, massa per aplicar directament una tècnica de classificació probabilística com ara l'anàlisi discriminant lineal (LDA). Cal, doncs, procedir a realitzar necessàriament una selecció de variables.

La selecció es va realitzar per SLDA, amb les restriccions habituals (valor de tall de l'estadístic de Wilks i un nombre màxim de variables predictores seleccionades igual a vint, per tal de disposar d'una relació com a mínim igual a tres entre el nombre d'objectes i el nombre de variables).

La figura 10 mostra el resultat representat a l'espai de les dues variables canòniques de l'anàlisi discriminant lineal. La separació de les tres classes és perfecta. D'altra banda, la validació realitzada amb l'estratègia d'una validació «total» o, fins i tot, amb altres procediments de validació més elaborats indica una capacitat de predicció del 100 %.

Simplement un detall: el nom del conjunt de dades FAN és una abreviatura de FANTASY. Les dades són dades artificials

obtingudes d'una distribució normal N(0;1), la mateixa per a les tres classes.

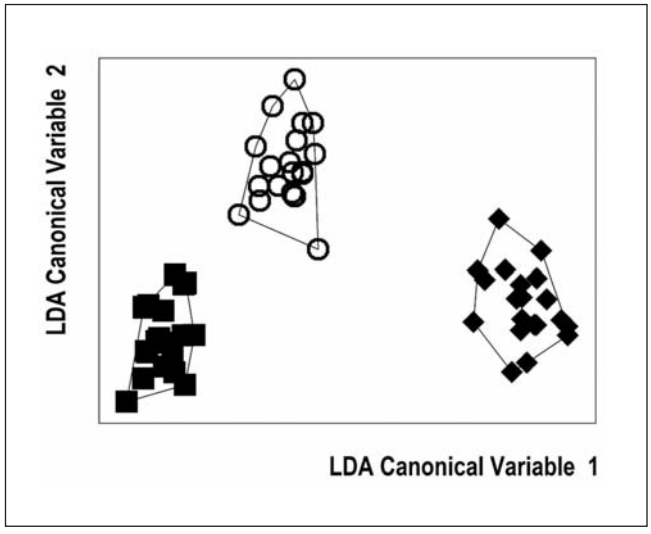


FIGURA 10. Conjunt de dades FAN: representació a l'espai de les variables canòniques LDA.

Validació

Com és possible que s'hagi obtingut aquest resultat?

En l'estratègia habitual de selecció de variables mitjançant SLDA s'utilitzen tots els objectes a la fase de selecció. La validació es realitza en una etapa posterior per validar el model amb les variables seleccionades. Aquest esquema es representa a la figura 11*a*.

El fet de realitzar una validació completa significa que la selecció de variables s'aplica també als grups definits en validació creuada, tal com mostra l'esquema representat a la figura 11*b*.

Si fem servir la validació completa sobre el conjunt de dades FAN, s'obtenen els valors de la capacitat de predicció que mostra la figura 12. S'evidencia que la capacitat de predicció és lluny del 100 % i que, quan augmenta el nombre de variables seleccionades, baixa exactament fins a un 33 % el que es pot esperar de la classificació aleatòria en el cas de tres categories.

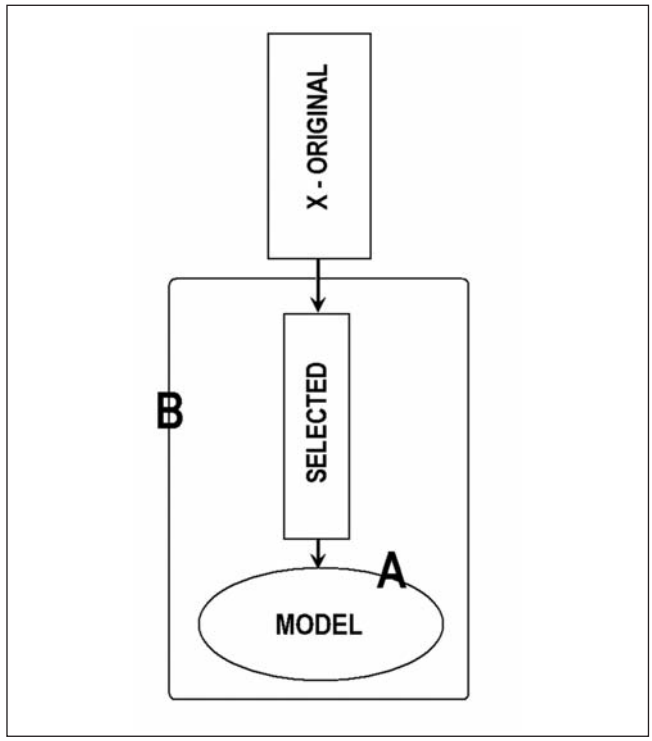


FIGURA 11. *a)* Validació habitual; *b)* validació completa.

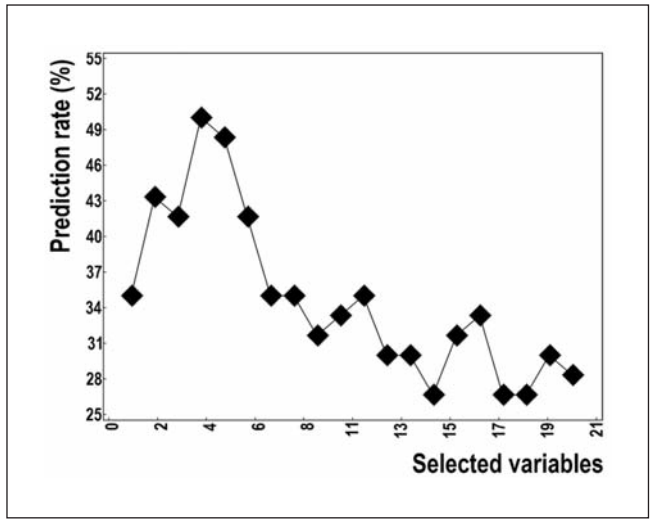


FIGURA 12. Conjunt de dades FAN: capacitat de predicció avaluada mitjançant validació completa en funció del nombre de variables seleccionades per SLDA.

Conclusions

La imatge generalitzada de la quimiometria no és la que ofereixen les poques persones que fan servir acuradament les eines d'aquesta disciplina amb una plena comprensió de la teoria en la qual es fonamenten, les seves limitacions i el compliment o no de les hipòtesis subjacents.

La imatge real és la que resulta de la utilització de la quimiometria en milions de determinacions rutinàries, els *bestsellers* de la quimiometria.

En aquest cas, les eines quimiomètriques poden ser aplicades sense un coneixement suficient i, molt sovint, amb una sobrevaloració de les seves possibilitats o altres circumstàncies que poden ser molt crítiques.

Creiem que els veritables quimiòmetres han de fer un esforç per apropar-se als problemes reals, potser de baix nivell, per mostrar la manera correcta de treballar, tant amb el seu exemple com amb la seva pedagogia.

Agraïments

Volem agrair sinceramente als organitzadors d'aquest IX Memorial Enric Casassas la invitació a presentar aquesta conferència.

Hom recorda una persona per la seva qualitat humana, per la seva simpatia o pel temps passat junts.

Per tal de recordar un científic, necessàriament cal alguna cosa més.

Un científic eminent, un excel·lent professor que mereix ser recordat pels seus col·legues i estudiants, ha ser capaç de mirar al futur per adonar-se de quina serà l'evolució de la seva ciència. No és gens senzill, però sí molt poc freqüent.

L'Enric Casassas tenia aquest do.

Referències

[1] Stevenson, D. F.; Stross, F. H.; Heizer, R. F. *Archaeometry* **1971**, *13*, 17.
[2] Harper, A. M.; Duewer, D. L.; Kowalski, B. R.; Fashing, J. L. a *Chemometrics: Theory and applications.* Kowalski, B. R. American Chemical Society: Washington, **1977**, p. 14-52. (ACS Symposium Series; 52).
[3] Saxberg, B. E. H.; Duewer, D. L.; Booker, J. L.; Kowalski, B. R. *Anal. Chim. Acta* **1978**, *103*, 201.
[4] Casale, M.; Casolino, C.; Oliveri, P.; Forina, M. *Food Chemistry* **2010**, *118*, 163.
[5] Wold, S. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* **1995**, *30*, 115.

M. Forina

Michele Forina va néixer a Torí (Itàlia) i es va llicenciar en química per la Universitat La Sapienza de Roma. És catedràtic de química analítica a l'Instituto di Analisi e Tecnologie Farmaceutiche ed Alimentari de la Universitat de Gènova. El professor Forina és un dels impulsors de la quimiometria en l'àmbit internacional i ha tingut molta influència en el naixement i posterior desenvolupament d'aquesta ciència a Catalunya i a la resta de l'Estat espanyol, tot mantenint contactes constants amb diferents grups de treball. Juntament amb el professor Enric Casassas, va crear el Colloquium Chimiometricum Mediterraneum el 1987, que ha estat un punt de trobada bianual dels investigadors en quimiometria de parla llatina. És autor de més d'un centenar de treballs, de diversos llibres i del conegut programari *Parvus*, tot un clàssic en l'àmbit quimiomètric. Ha estat president de la International Chemometrics Society i membre de l'equip editorial de *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* i del *Journal of Food Technology*.