

Una vita di predizione.
Appunti personali sulla chemiometria di inizio millennio
Federico Marini

La chemiometria è un campo di ricerca altamente interdisciplinare che con gli anni ha visto progressivamente aumentare la sua rilevanza nell'ambito delle discipline chimiche, in generale, e della chimica analitica, in particolare, anche in virtù dei molteplici traguardi che essa abbia raggiunto. L'impiego della chemiometria si è esteso ad un gran numero di applicazioni, soprattutto ma non esclusivamente analitiche, dove ha contribuito a rivoluzionare gran parte delle fasi del processo analitico e, al contempo, alla risoluzione di problemi sempre più complessi.

In questo contesto, è fondamentale sottolineare come, a differenza di altre discipline che si fondano sull'analisi dei dati, la chemiometria si situa a tutti gli effetti all'interno della chimica e non possa prescindere dalle conoscenze chimiche come lente attraverso la quale leggere i fenomeni osservati; simmetricamente, i principali sviluppi della chemiometria hanno seguito l'evoluzione della complessità delle problematiche da affrontare e l'estensione degli ambiti di applicazione (ad esempio, l'analisi di immagini iperspettrali o le scienze omiche e la biologia dei sistemi).

Partendo da tali premesse, in questa comunicazione, saranno descritte alcune delle principali direzioni lungo le quali la ricerca chemiometrica più recente si stia muovendo, viste attraverso lo sguardo, necessariamente parziale, del relatore. In particolare, saranno trattate tematiche quali la fusione di dati di diversa natura, approcci efficienti al trattamento del segnale, la ricerca di biomarcatori affidabili, l'integrazione dell'informazione spaziale fornita dalle tecniche di microscopia e imaging, giusto per citarne alcune, e sarà inoltre evidenziato come, in ciascuno di questi ambiti, non si possa prescindere dalla validazione dei risultati ottenuti e della conseguente interpretazione che se ne possa ricavare.