



Workshop dedicato alla Chemometria Applicata alla Spettroscopia NMR

mercoledì 13 giugno 2012

Istituto di Ricerche Chimiche e Biochimiche G.
Ronzoni - Via G. Colombo 81 - 20133 MILANO

Programma

9.00-9.30 Iscrizione

9.15-9.30 Apertura dei lavori: **Dr. Giangiacomo Torri**

Prima Sessione : Chemometria applicata alla spettroscopia magnetica nucleare NMR (Chair: *Dr. Silvia Mari, Ospedale S. Raffaele/ Fondazione Telethon*)

9.30-10.20 **Dr. José Garcia Manteiga (Ospedale S. Raffaele)**

Introduction to Chemometry

10.20-11.10 **Dr. Silvia Mari and Dr. Manuel Perez** (Ospedale San Raffaele, Mestrelab Research)

From Spectra to Matrix: a practical overview.

11.10-11.30 pausa caffè

11.30- 12.20 **Dr. Debora Paris** (Istituto di Chimica Biomolecolare del CNR di Pozzuoli -ICB CNR)

Introduction to Multivariate Data Analysis

12.20-13.10 **Dr. Edoardo Gaude** (Ospedale S. Raffaele)

"Zapping" through software for the statistical analysis of spectroscopic data

13.10-14.30 pausa pranzo

Seconda Sessione: Costruzione di modelli chemometrici (Chair: *Giovanna Musco, San Raffaele*)

14.30-15.20 **Dr. Debora Paris** (Istituto di Chimica Biomolecolare del CNR di Pozzuoli -ICB CNR)

Refining metabolomic models: application of supervised methods and data filtering

15.20-16.10 **Dr. Claudia Napoli** (Bruker, Milano)

Statistics and NMR: a case study on human pancreatic cancer

16.10-17.00 **Prof. Ed Yates** (Institute of Integrative Biology University of Liverpool)

Analytical methods for heterogeneous bio-drugs

17.00-17.30 **Dr. Silvia Mari and Dr. Giovanna Musco** (Ospedale S. Raffaele/ Fondazione Telethon) *Panel Discussion*

Scopo del Workshop

Fornire ai partecipanti una panoramica dei più comuni metodi chemometrici per l'analisi di spettri NMR in metabolomica.

Oltre alle problematiche relative al post-processing dei dati, (quali ad esempio l'allineamento di spettri, le diverse strategie di binning, la normalizzazione e la scalatura), verranno introdotti i concetti base di analisi univariata e multivariata e la loro applicazione nella costruzione di modelli.

Informazioni

- Il Workshop è promosso dal Gruppo Italiano Discussione Risonanze Magnetiche (GIDRM)
- **Luogo:** Istituto di Ricerche Chimiche e Biochimiche G. Ronzoni (per informazioni consultare il sito www.ronzoni.it)
- La registrazione dovrà essere effettuata entro il giorno 8 giugno 2012 compilando il modulo disponibile all'indirizzo www.gidrm.org
- Quote di iscrizione: 30 € per i soci in regola con il pagamento 2012; 40 € (comprensivi di iscrizione al GIDRM per il 2012) per gli altri.

Grazie a:



Comitato Scientifico

Henriette Molinari, Fabio Arnesano,
Marco Geppi, Stefano Mammi, Luisa Mannina,
Mario Piccoli, Enzo Terreno