

FEDERICO MARINI Curriculum Vitae

Luogo: Roma
Data: 06/04/2021

Parte I – Informazioni generali

Nome e Cognome	Federico Marini
Lingue	Italiano, Inglese, Francese, Spagnolo

Parte II – Istruzione

Tipo	Anno	Istituzione	Note
Maturità classica	1995	Liceo Terenzio Mamiani (Roma)	Votazione: 60/60
Laurea	2000	Università di Roma “La Sapienza”	Laurea in Chimica (votazione: 110 e lode)
PhD	2004	Università di Roma “La Sapienza”	Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche (XVI ciclo). Titolo della tesi: “A chemometric approach to the evaluation of the quality of foodstuffs”
ASN	2013	MIUR	Bando D.D. 222/2012, Abilitazione Scientifica Nazionale alle Funzioni di Professore Universitario di Seconda Fascia, Settore Concorsuale 03/A1, Chimica Analitica, SSD CHIM/01
ASN	2014	MIUR	Bando D.D. 161/2013, Abilitazione Scientifica Nazionale alle Funzioni di Professore Universitario di Prima Fascia, Settore Concorsuale 03/A1, Chimica Analitica, SSD CHIM/01
ASN	2018	MIUR	Bando D.D. 1532/2016, Abilitazione Scientifica Nazionale alle Funzioni di Professore Universitario di Prima Fascia, Settore Concorsuale 03/A1, Chimica Analitica, SSD CHIM/01

Parte III – Incarichi

IIIa – Incarichi Accademici

Inizio	Fine	Istituzione	Posizione
1/11/2008	2/1/2018	Università di Roma “La Sapienza”	Ricercatore Universitario presso il Dipartimento di Chimica – SSD CHIM/01
3/1/2018	oggi	Università di Roma “La Sapienza”	Professore di II fascia, Settore concorsuale 03/A1, SSD CHIM/01, Chimica Analitica
1/6/2017	oggi	Stellenbosch University (Sudafrica)	Professor Extraordinary presso il Department of Food Science

IIIb – Altri Incarichi

Inizio	Fine	Istituzione	Posizione
1/2/2004	30/4/2004	Università di Roma “La Sapienza”	Contratto di collaborazione coordinata e continuativa presso il Dipartimento di Chimica nell’ambito del progetto di ricerca: “Messa a punto di metodi chemiometrici per la valutazione della qualità di prodotti agro-alimentari”
1/8/2004	31/7/2008	Università di Roma “La Sapienza”	Assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica. Titolo della ricerca: “Analisi multivariata della qualità: classificazione, previsione, ottimizzazione” (Assegno biennale rinnovato per un ulteriore biennio)
2004	2008	Università degli studi de L’Aquila	Professore a contratto (SSD CHIM/01, Chimica Analitica)
1/9/2008	31/10/2008	Università di Roma “La Sapienza”	Borsa di studio presso il Dipartimento di Chimica. Titolo della ricerca: “Ottimizzazione di metodi chemiometrici per l’analisi di dati ottenuti nell’ambito del progetto: Analisi metabolomica, basata su dati di spettroscopia RMN ad alta risoluzione, per la rilevazione della variabilità biochimica individuale correlata con l’attività sportiva intensa e l’uso di una bevanda idrico-salina antiossidante ed energetica”

A.a. 2010/2011	A.a. 2012/2013	Università di Roma “La Sapienza”	Membro del Collegio dei docenti del Dottorato di ricerca in Chimica analitica dei sistemi reali
2012	2013	Università di Roma “La Sapienza”	Membro della Commissione Criteri del Dipartimento di Chimica
2017	oggi	Università di Roma “La Sapienza”	Membro del Consiglio Scientifico del Centro di Ricerca per le Scienze applicate alla Protezione dell’Ambiente e dei Beni Culturali (CIABC)
2018	oggi	Università di Roma “La Sapienza”	Membro della Commissione di Gestione della Assicurazione della Qualità (CGAQ) del CdS in Chimica Analitica
2019	oggi	Università di Roma “La Sapienza”	Membro del Comitato di Gestione del Laboratorio NMLab Sapienza
2020	oggi	Università di Roma “La Sapienza”	Membro della Commissione Ricerca e terza missione del Dipartimento di Chimica
2021	oggi	Università di Roma “La Sapienza”	Membro della Commissione Didattica del CAD in Chimica
2021	oggi	Università di Roma “La Sapienza”	Membro del Collegio dei docenti del Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche

IIIc – Partecipazioni a commissioni internazionali per il conferimento del titolo di PhD

Anno	Istituzione	Dettagli
15/5/2012	University of Granada (Spagna)	Membro della commissione per la difesa della tesi di dottorato di Cristina Ruiz Samblas
8/11/2013	University of Copenhagen (Danimarca)	Membro della commissione per la difesa della tesi di dottorato di Bekzod Khakimov
7/7/2015	University of Barcelona (Spagna)	Membro della commissione per la difesa della tesi di dottorato di Xin Zhang
13/5/2016	University of Tarragona (Spain)	Membro della commissione per la difesa della tesi di dottorato di Eva Borrás Iglesias
7/4/2017	Radboud University (Nijmegen, Olanda)	Membro della commissione per la difesa della tesi di dottorato di Jan Gerretzen
31/10/2018	University of Barcelona (Spagna)	Membro della commissione per la difesa della tesi di dottorato di Sanae Benabou
3/10/2019	Radboud University (Nijmegen, Olanda)	Membro della commissione per la difesa della tesi di dottorato di Rita Folcarelli
30/10/2019	Norwegian University of Life Sciences (Norvegia)	Membro della commissione per la difesa della tesi di dottorato di Petter Stefansson

10/1/2020	University of Aix-Marseille (Francia)	Membro della commissione per la difesa della tesi di dottorato di Astrid Malechaux
-----------	---------------------------------------	--

IIIId – Partecipazioni a commissioni nazionali per il conferimento del titolo di dottore di ricerca

Anno	Istituzione	Dettagli
2010	Università degli studi dell’Insubria	Membro della Commissione giudicatrice per il conferimento del titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Ambientali (XXIII ciclo), nominato con D.R. n. 16697 prot. N. 16692 del 8/11/2010
2011	Università degli studi di Modena e Reggio Emilia	Membro della Commissione giudicatrice per il conferimento del titolo di Dottore di Ricerca in “Modellistica, simulazione computazionale e caratterizzazione multiscala per le scienze dei materiali e della vita” (XXIII ciclo)
2014	Università degli studi di Modena e Reggio Emilia	Membro della Commissione giudicatrice per il conferimento del titolo di Dottore di Ricerca in “Modellistica, simulazione computazionale e caratterizzazione multiscala per le scienze dei materiali e della vita”, e in “Modellistica, simulazione computazionale e caratterizzazione multiscala per le scienze dei materiali e della vita” (XXV e XXVI ciclo), nominato con D.R. 12 del 15/1/2014
2019	Università di Roma “La Sapienza”	Membro della Commissione giudicatrice per il conferimento del titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche (XXXII ciclo)
2021	Università degli studi de L’Aquila	Membro della Commissione giudicatrice per il conferimento del titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Fisiche e Chimiche (XXXIII ciclo), nominato con D.R. 253/2021 del 18/3/2021

IIIe – Soggiorni di studio e ricerca all’estero e fellowships

Anno	Istituzione	Dettagli
1997	B.A.S.F. (Ludwigshafen, Germania)	Training stage per studenti internazionali (2 settimane)
2003	National Institute of Chemistry (Lubiana, Slovenia)	Visiting student (1 mese)
2003	National Institute of Chemistry (Lubiana, Slovenia)	Marie Curie fellow (3 mesi) nell’ambito del progetto Marie Curie Host Training Site no. HPMT-CT2001-00240 (Chemometrical treatment of toxic compounds-endocrine

		disrupters) sotto la supervisione della dr.ssa Marjana Novic
2007	University of Copenhagen (Danimarca)	Visiting researcher (1 mese)
2008	University of Copenhagen (Danimarca)	Visiting researcher (5 mesi)
2009	University of Copenhagen (Danimarca)	Visiting researcher (1 mese)
2010	University of Copenhagen (Danimarca)	Visiting researcher (1 mese)
2014	University of Stellenbosch (Sudafrica)	Visiting professor (2 settimane)
2015	University of Silesia (Katowice, Polonia)	Visiting professor (2 settimane)
2015	NOFIMA (Ås, Norvegia)	Visiting researcher (1 mese)
2016	University of Stellenbosch (Sudafrica)	Visiting professor (2 settimane)
2016	University of Lille (Francia)	Visiting professor (2 settimane)
2016	University of Silesia (Katowice, Polonia)	Visiting professor (2 settimane)
2018	IRSTEA (Montpellier, Francia)	Visiting professor (4 mesi)
2018	University of Silesia (Katowice, Polonia)	Visiting professor (2 settimane)
2019	University of Stellenbosch (Sudafrica)	Visiting professor (2 settimane)
2019	Hanoi University of Pharmacy (Vietnam)	Visiting professor (1 settimana)
2020	University of Stellenbosch (Sudafrica)	Visiting professor (2 settimane)

Parte IV – Attività didattica e di supervisione

IVa – Insegnamenti in corsi di laurea nella sede di appartenenza

AA.AA.	Istituzione	Corso
Dal 2008/2009 al 2009/2010	Università di Roma “La Sapienza”	Chimica dei sistemi acquiferi per il Corso di Laurea Triennale in Chimica (ord.509/99; orientamento Chimica dell’ambiente)
Dal 2008/2009 al 2009/2010	Università di Roma “La Sapienza”	Chemiometria per il Corso di Laurea Triennale in Chimica (ord.509/99; orientamento Chimica analitica merceologica)
Dal 2009/2010 ad oggi	Università di Roma “La Sapienza”	Chemiometria per il Corso di Laurea Magistrale in Chimica Analitica (ord.270/04)

Dal 2017/2018 ad oggi	Università di Roma “La Sapienza”	Chimica Analitica II con Laboratorio per il Corso di Laurea Triennale in Chimica (ord.270/04)
-----------------------------	----------------------------------	---

IVb – Insegnamenti in corsi di dottorato nella sede di appartenenza

AA.AA.	Istituzione	Corso
Dal 2009/2010 al 2011/2012	Università di Roma “La Sapienza”	Elementi di chemiometria con MATLAB per il Dottorato di Ricerca in Scienze Applicate per la Protezione dell'Ambiente e dei Beni Culturali
2012/2013	Università di Roma “La Sapienza”	Elementi di chemiometria con MATLAB per il Dottorato di Ricerca in Scienze della Terra
Dal 2014/2015 ad oggi	Università di Roma “La Sapienza”	Chemiometria applicata con elementi di MATLAB per il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche

IVc – Insegnamenti in master nella sede di appartenenza

AA.AA.	Istituzione	Insegnamento
2003/2004	Università di Roma “La Sapienza”	Analisi multivariata nel controllo delle frodi in campo alimentare (4 ore) per il master “Sicurezza e qualità degli alimenti e delle bevande dalla produzione al consumo”
Dal 2012/2013 ad oggi	Università di Roma “La Sapienza”	Chemiometria/Statistica (3.5 ore) per il master “Caratterizzazione e tecnologie per la bonifica dei siti inquinati”

IVd – Insegnamenti in corsi di laurea in altre sedi nazionali

AA.AA.	Istituzione	Corso
2003/2004	Università degli studi de L’Aquila	Chimica Computazionale I per i CdL in Scienze e Tecnologie Chimiche e dei Materiali e in Scienze e Tecnologie per l’Ambiente
2004/2005	Università degli studi de L’Aquila	Chemiometria per i CdL in Scienze e Tecnologie Chimiche e dei Materiali e in Scienze e Tecnologie per l’Ambiente
Dal 2006/2007 al 2007/2008	Università degli studi de L’Aquila	Complementi di Chimica Analitica per il CdL in Scienze e Tecnologie Chimiche e dei Materiali

IVe – Altri insegnamenti in sedi nazionali ed internazionali

Anno	Istituzione	Corso
------	-------------	-------

Dall'a.a. 2006/2007 all'a.a. 2017/2018	Università degli studi di Modena e Reggio Emilia	Nature Inspired Methods in Data Analysis: Neural Networks (6 ore) per gli studenti della Scuola di Dottorato in Modellistica, Simulazione Computazionale e Caratterizzazione Multiscala per le Scienze dei Materiali e della Vita (fino all'a.a.2012/2013) e del Dottorato in Models and Methods for Material and Environmental Sciences (dall'a.a. 2013/2014 in poi)
2012	University of Copenhagen (Danimarca)	Classification (9 ore)
2013	Umeå University (Svezia)	Clustering and classification (6 ore)
2013	University of Copenhagen (Danimarca)	Advanced classification methods (21 ore) per la Copenhagen School of Chemometrics CSC2013
2016	Stellenbosch University (Sudafrica)	Matlab for chemometrics (6 ore)
2016	University of Lille (Francia)	Chemometrics: Clustering, Classification and Regression from scratch (8 ore)
2016	University of Copenhagen (Danimarca)	Non-linear modeling (24 ore) per la Copenhagen School of Chemometrics CSC2016
2017	University of Copenhagen (Danimarca)	Linear models (12 ore) per la Copenhagen School of Chemometrics CSC2017 (codocenza con il prof. Age Smilde dell'Università di Amsterdam)
2017	University of Copenhagen (Danimarca)	Linear regression (16 ore) per la Copenhagen School of Chemometrics CSC2017
2018	University of Copenhagen (Danimarca)	Linear models (14 ore) per la Copenhagen School of Chemometrics CSC2018 (codocenza con il prof. Age Smilde dell'Università di Amsterdam)
2019	Stellenbosch University (Sudafrica)	Chemometrics (10 ore)
2019	Hanoi University of Pharmacy (Vietnam)	Chemometrics (12.5 ore)
2019	University of Copenhagen (Danimarca)	Non-linear modeling (28 ore) per la Copenhagen School of Chemometrics CSC2019
2020	Stellenbosch University (Sudafrica)	Introduction to chemometrics (21 ore)
2020	University of Copenhagen (Danimarca)	Multi-block modeling/Data fusion (14 ore) per la International School of Chemometrics CSC2020

IVf – Short courses, pre-conference courses ed altre attività didattiche

Anno	Luogo/Evento	Corso
2002	Corsi di riqualificazione del personale del Ministero delle Politiche Agricole	Metodi statistici in chimica analitica (2 moduli da 6 ore ciascuno: "Valutazione

	e Forestali (profili: Direttori Chimici e Direttori Tecnici di Laboratorio) istituiti dalla Scuola Superiore dell'Economia e delle Finanze	statistica” e “Ripetibilità, riproducibilità e incertezza di misura nei risultati”)
2004	Corso di formazione per Tecnico di controllo e assicurazione qualità nella filiera alimentare presso la STEP Consortile di Latina	Strumenti statistici per la qualità (46 ore)
2004	Consiglio Nazionale delle Ricerche (Istituto di Metodologie Chimiche)	Analisi multivariata e sue applicazioni (6 lezioni da due ore ciascuna)
2012	2 nd African-European Conference on Chemometrics (Afrodata 2012). Stellenbosch, Sudafrica, 19-23 Novembre 2012	Pre-conference course “Multivariate classification methods” (6 ore; co-docenza con la prof. Beata Walczak della University of Silesia)
2012	Scuola nazionale di Chimica Analitica per dottorandi. Roma 1-5 ottobre 2012	Chemiometria (2 ore)
2013	1 st Multi-way/set/level/block school. Roma 30 aprile-3 maggio 2013	Classification and regression (3 ore)
2013	Second International Conference on New Trends in Chemometrics and Applications (NTCA-2013). Ankara, Turchia, 23-28 ottobre 2013	Pre-conference course Experimental design and optimization (2 ore)
2014	Scuola nazionale di Chimica Analitica per dottorandi. Roma 22-26 settembre 2014	Chemiometria (2 ore)
2015	Euroanalysis XVIII. Bordeaux, Francia, 6 – 10 settembre 2015	Pre-conference course Chemometrics I: Introduction and exploratory data analysis (3 ore)
2015	Euroanalysis XVIII. Bordeaux, Francia, 6 – 10 settembre 2015	Pre-conference course Chemometrics II: Predictive modeling – Calibration and classification (3 ore)
2016	Third International Conference on New Trends in Chemometrics and Applications (NTCA-2016). Side-Antalya, Turchia, 23-28 maggio 2016	Pre-conference course Experimental design and optimization (2.5 ore)
2016	XVI Chemometrics in Analytical Chemistry (CAC2016). Barcelona, Spagna, 6-10 giugno 2016	Pre-conference course ANOVA-SCA (ASCA) and Multilevel-SCA (MSCA) (3 ore; co-docenza con il prof. Age Smilde dell’Università di Amsterdam)
2016	XVI Chemometrics in Analytical Chemistry (CAC2016). Barcelona, Spagna, 6-10 giugno 2016	Pre-conference course Classification methods (3 ore)
2016	Radboud Summer School on Chemometrics presso la Radboud University. Nijmegen, Olanda, 8-12 agosto 2016	Validation (2 ore)

2016	Scuola nazionale di Chimica Analitica per dottorandi. Roma 25-30 settembre 2016	Chemimetria (2 ore)
2016	7° Simposio italiano di Spettroscopia NIR (NIRItalia 2016). Milano, 12-14 ottobre 2016	Pre-corso Validazione dei modelli chemiometrici (2 ore)
2017	Euroanalysis XIX. Stoccolma, Svezia, 28 agosto – 1 settembre 2017	Pre-conference course Basic chemometrics (3 ore)
2017	7th International Chemometrics Research Meeting (ICRM2017). Bergen Dal, Olanda, 10-14 settembre 2017	Tutorial ASCA (2 ore; co-docenza con il prof. Age Smilde dell'Università di Amsterdam)
2017	Summer School on Image Analysis and Hyperspectral Imaging. Roma 20-22 settembre 2017	Basic chemometrics (1.5 ore)
2017	Summer School on Image Analysis and Hyperspectral Imaging. Roma 20-22 settembre 2017	Hyperspectral data processing: Regression and curve resolution (1.5 ore)
2017	Summer School on Image Analysis and Hyperspectral Imaging. Roma 20-22 settembre 2017	Combining the information from multiple images (1.5 ore)
2018	Radboud Summer School on Chemometrics presso la Radboud University. Nijmegen, Olanda, 13-17 agosto 2018	Validation (1 ora) & ASCA (1 ora)
2019	Winter School SISNIR: Combining NIR Spectroscopy and Chemometrics. Milano, 14-18 gennaio 2019	Analisi delle componenti principali (2 ore) e Preprocessing (1 ora)
2019	Fourth International Conference on New Trends in Chemometrics and Applications (NTCA-2019). Didim, Turchia, 30 aprile-4 maggio 2019	Pre-conference course Experimental design and optimization (3 ore)
2019	10th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (ICAVS 10). Auckland, Nuova Zelanda, 7-12 luglio 2019	Pre-conference workshop Basic chemometrics with MATLAB (4 ore)
2019	Euroanalysis XX. Istanbul, Turchia, 31 agosto – 5 settembre 2019	Pre-conference course Introduction to chemometrics (6 ore; co-docenza con il prof. Roma Tauler del CSIC-IDAEA di Barcelona)
2019	NIR 2019. Gold Coast, Australia, 14-20 settembre 2019	Pre-conference workshop Chemometrics (6 ore)

IVg – Supervisione di tesi di dottorato

Periodo	Istituzione	Dettagli
2010-2013	Università degli studi di Modena e Reggio Emilia	Co-supervisor (insieme alla prof. Marina Cocchi) della tesi di dottorato in Modellistica,

		Simulazione Computazionale e Caratterizzazione Multiscala per le Scienze dei Materiali e della Vita di Elisa Salvatore (XXVI ciclo). Titolo della tesi: “Multiset and Multi-way Approaches in Food Authentication”
2011-2014	Università di Roma “La Sapienza”	Supervisor della tesi di dottorato in Scienze Chimiche di Marta Bevilacqua (XXVII ciclo). Titolo della tesi: “Development of chemometric approaches for ensuring food quality and safety”
2013-2018	Università di Roma “La Sapienza”	Supervisor della tesi di dottorato in Scienze Chimiche di Silvia De Luca (XXIX ciclo). Titolo della tesi: “Development of innovative analytical approaches for the characterization of food commodities”
2016-2019	Università di Roma “La Sapienza”	Supervisor della tesi di dottorato in Scienze Chimiche di Patrizia Firmani (XXXII ciclo). Titolo della tesi: “Advanced chemometric approaches for the verification of contaminations, adulterations and counterfeits”
2017-oggi	University College Dublin (Irlanda)	Co-supervisor (insieme alla prof. Aoife Gowen) della tesi di dottorato di Vicky Caponigro (School of Biosystems and Food Engineering). Titolo provvisorio della tesi: “Multiscale hyperspectral imaging of bacteria”
2019-oggi	Università di Roma “La Sapienza”	Co-supervisor (insieme alla dr.ssa Giovanna Tranfo) della tesi di dottorato in Scienze Chimiche di Flavia Buonauro (XXXV ciclo).
2021-oggi	Stellenbosch University (Sudafrica)	Co-supervisor (insieme alla prof.ssa Marena Manley) della tesi di dottorato di Manda Rossouw (Department of Food Science). Titolo provvisorio della tesi: “Multivariate statistical modelling of sensory quality and Arrhenius shelf life prediction of flavoured cider”

IVh – Supervisione di studenti in visita da istituzioni estere

Anno	Istituzione di provenienza	Dettagli
2010	Bu-Ali Sina University (Iran)	Supervisor del dottorando Farzad Khajavi in visita per un periodo di 2.5 mesi
2011	University of Granada (Spagna)	Supervisor della dottoranda Cristina Ruiz Samblas in visita per un periodo di 1.5 mesi
2013	Universidade Federal do Paraná (Brasile)	Supervisor del dottorando Mario Sergio Piantavini in visita per un periodo di 6 mesi

2014-2015	University of Copenhagen (Danimarca)	Supervisor del dottorando Carl Emil Aae Eskildsen in visita per un periodo di 6 mesi
2015	INRA (Rouen, Francia)	Supervisor della studentessa Lea Roudier (Erasmus+) in visita per un periodo di 2.5 mesi
2017-2018	Shahrekord University (Iran)	Supervisor della dottoranda Shima Ghanavati Nasab in visita per un periodo di 8 mesi

IVi – Supervisione di laureandi

Anno	Istituzione	Dettagli
2008-oggi	Università di Roma “La Sapienza”	Relatore di 120 laureandi triennali (ord.509/99 e ord.270/04), 5 laureandi specialistici (ord.509/99), 90 laureandi magistrali (ord.270/04) e 3 laureandi quinquennali.

Parte V – Partecipazione a comitati editoriali

Anno	Rivista/Collana	Ruolo
2009-oggi	Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems (Elsevier)	Membro dell’Editorial board
2011-oggi	Analytica Chimica Acta (Elsevier)	Membro dell’Editorial board
2013-oggi	Encyclopedia of Analytical Chemistry (Wiley)	Associate Editor for Chemometrics
2013-2014	Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems (Elsevier)	Guest Editor del Virtual Special Issue: “Selected paper from the 8th Colloquium Chemiometricum Mediterraneum (CCM VIII 2013), Bevagna, Italy, 30th June–4th July 2013” (insieme alla prof.ssa Marina Cocchi, Università di Modena e Reggio Emilia)
2014-oggi	Frontiers in Medicine (Frontiers)	Review Editor (Section: Geriatric Medicine)
2015-oggi	International Journal of Analytical Chemistry (Hindawi)	Membro dell’Editorial board
2015-2017	Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems (Elsevier)	Guest Editor del Virtual Special Issue: “Multiway and multiset methods: ThRee-way methods In Chemistry And Psychology conference, 8th edition, 2015” (insieme alla prof.ssa Marina Cocchi, Università di Modena e Reggio Emilia)
2015-2020	Cogent Chemistry (Taylor and Francis)	Membro dell’Editorial board
2015-oggi	Journal of Near Infrared Spectroscopy (SAGE)	Membro dell’Editorial board
2016-oggi	Journal of Spectral Imaging (IM Publishing)	Membro dell’Editorial board

2016-oggi	Current Metabolomics (dal 2020: Current Metabolomics and Systems Biology, Bentham)	Membro dell'Editorial board
2017-2020	Comprehensive Chemometrics 2 nd Edition (Elsevier)	Membro dell'Editorial Advisory Board
2018-oggi	Journal of Chemometrics (Wiley)	Membro dell'Editorial board
2018-2019	Journal of Near Infrared Spectroscopy (SAGE)	Guest Editor dello Special Issue: "VIII Italian Symposium on Near Infrared Spectroscopy – NIRItalia 2018" (insieme alle dr.sse Monica Casale e Cristina Malegori, Università di Genova)
2018-2019	Frontiers in Chemistry (Frontiers)	Guest Editor del Research Topic: "Chemometrics-based Spectroscopy for Pharmaceutical and Biomedical Analysis" (insieme al prof. Hoang Vu Dang, Hanoi University of Pharmacy, Vietnam)
2019-2020	Journal of Chemometrics (Wiley)	Guest Editor dello Special Issue: "Orthogonal PLS (O-PLS) and related algorithms"
2019-2020	Applied Sciences (MDPI)	Guest Editor del Virtual Special Issue: "Application of Spectroscopy in Food Analysis" (insieme alla dr.ssa Alessandra Biancolillo, Università de L'Aquila)
2020-oggi	Applied Sciences (MDPI)	Membro dell'Editorial board
2020-2021	Applied Sciences (MDPI)	Guest Editor del Virtual Special Issue: "Application of Spectroscopy in Food Analysis: Volume II" (insieme alla dr.ssa Alessandra Biancolillo, Università de L'Aquila)
2021-oggi	Frontiers in Chemistry (Frontiers)	Guest Editor del Research Topic: "Novel Applications of Chemometrics in Analytical Chemistry and Chemical Process Industry" (insieme alla dr.ssa Alessandra Biancolillo, Università de L'Aquila, al prof. Angelo D'Archivio, Università de L'Aquila e al dr. Raffaele Vitale, University of Lille, Francia)
2021-oggi	Frontiers in Analytical Science (Frontiers). Rivista di nuova istituzione	Chief Editor per la sezione Chemometrics
2021-oggi	Food Control (Elsevier)	Membro dell'Editorial board
2021-oggi	Journal of Chemometrics (Wiley)	Guest Editor dello Special Issue: "ASCA and related methods" (insieme alla dr.ssa Ingrid Måge, NOFIMA, Norvegia)
Dal 1/9/2021	Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems (Elsevier)	Editor (contratto di nomina firmato il 1/3/2021)

Parte VI – Partecipazione a commissioni di valutazione e panels nazionali ed internazionali

Anno	Istituzione	Ruolo
2012	MIUR	Reviewer di proposte progettuali nell'ambito del programma Futuro in Ricerca 2012
2013	Division for Chemical Sciences (CW) of the Netherlands Organisation for Scientific Research (NWO)	Reviewer di proposte progettuali nell'ambito del programma ECHO
2013	European Research Council (ERC)	Reviewer di proposte progettuali nell'ambito del programma ERC Starting Grant 6th Call - 2013
2014	National Research Foundation of South Africa	Reviewer di proposte progettuali nell'ambito del programma South Africa/Japan Joint Science and Technology Research Collaboration (Call for project proposals 2013)
2016	National Research Foundation of South Africa	Reviewer di proposte progettuali (Call for project proposals 2016)
2017	Innovation Fund Denmark (IFD)	Reviewer di proposte progettuali
2017	National Research Foundation of South Africa	Reviewer di proposte progettuali nell'ambito del programma Thuthuka (Call for project proposals 2017)
2016-2020	EU Innovative Medicines Initiative Joint Undertaking	Membro del Data Safety Monitoring Board del progetto SPRINTT (Sarcopenia and Physical frailty IN older people: multi-component Treatment strategies; Grant Agreement n° 115621)
2018	National Research Foundation of South Africa	Reviewer di proposte progettuali nell'ambito dei programmi Thuthuka e Competitive Support for Unrated Researchers (CSUR) (Call for project proposals 2018)
2018	Alberta Innovates (Canada)	Reviewer di proposte progettuali nell'ambito del programma Strategic Research Projects
2019	Research Foundation Flanders (FWO)	Reviewer di proposte progettuali nell'ambito del programma Bilateral Scientific Cooperation Russia (RSF)
2019	IRSTEA (Francia)	Partecipazione alla commissione di concorso per una posizione di Chargé de recherche en " <i>Chimométrie</i> "

Parte VII – Premi

Anno	Titolo
2001	Premio di Laurea della Divisione di Chimica Analitica della Società Chimica Italiana
2006	Premio Giovane Ricercatore della Divisione di Chimica Analitica della Società Chimica Italiana

2012	Elsevier Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems Award “for his contribution to the development of chemometrics”
------	--

Parte VIII – Ruoli di rilievo in società scientifiche nazionali ed internazionali

Anno	Istituzione	Ruolo
2011-2015	Gruppo divisionale di Chemiometria (Divisione di Chimica Analitica della Società Chimica Italiana)	Membro del Direttivo
2012-2019	Chemometrics study group (Division of Analytical Chemistry, EuChemS)	Membro
2014-2018	Società Italiana di Spettroscopia NIR (SISNIR)	Membro del Consiglio direttivo
2015-2019	Gruppo divisionale di Chemiometria (Divisione di Chimica Analitica della Società Chimica Italiana)	Coordinatore
2018-oggi	Società Italiana di Spettroscopia NIR (SISNIR)	Membro del Consiglio direttivo con funzioni di Vice Presidente
2019-oggi	Gruppo divisionale di Chemiometria (Divisione di Chimica Analitica della Società Chimica Italiana)	Membro del Direttivo in qualità di precedente Coordinatore
2019-oggi	Chemometrics study group (Division of Analytical Chemistry, EuChemS)	Coordinatore

Parte IX – Congressi, workshops e scuole

IXa – Partecipazioni a conferenze nazionali ed internazionali in qualità di invited speaker

Anno	Evento (luogo, data)	Dettagli
2005	Conferentia Chemometrica 2005 – Chemometrics VII, Hajduszoboszlo (Ungheria), 28-31 agosto 2005.	Invited lecture: “ <i>Class-modeling for food authentication</i> ”
2006	3 rd International Symposium on Computer Applications and Chemometrics in Analytical Chemistry – SCAC2006, Lago Balaton (Ungheria), 3-7 luglio 2006	Invited lecture: “ <i>Use of different artificial neural networks architectures for food authentication</i> ”
2007	XXXI Symposium on Chromatographic methods of Investigating the organic compounds, Szczyrk (Polonia), 4-6 giugno 2007.	Invited plenary lecture: “ <i>Classification models in chromatography</i> ”
2007	Conferentia chemometrica 2007, Budapest (Ungheria), 2-5 settembre 2007	Invited lecture: “ <i>SIMCA-like class modeling using artificial neural networks</i> ”
2007	VI Colloquium Chemiometricum mediterraneum, Saint Maximin La	Invited plenary lecture: “ <i>Artificial neural networks for classification and modeling</i> ”

	Sainte Baume (Francia), 5-7 settembre 2007	
2008	CMA4CH08 – Multivariate analysis and chemometrics applied to environment and cultural heritage, Ventotene, 1-4 giugno 2008	Invited plenary lecture: “ <i>Classification methods in chemometrics</i> ”
2008	4 th International Symposium on Computer Applications and Chemometrics in Analytical Chemistry – SCAC2008, Balatonalmadi (Ungheria), 1-4 settembre 2008	Invited lecture: “ <i>Coupling of IR measurements and multivariate calibration techniques for the determination of enantiomeric excess in pharmaceutical preparations</i> ”
2009	FSKD09 – Sixth International conference on Fuzzy Systems and Knowledge Discovery, Tianjin (Cina), 14-16 agosto 2009	Invited lecture: “ <i>Non linear class-modeling using artificial neural networks</i> ”
2009	Conferentia Chemometrica 2009, Siofok (Ungheria), 27-30 settembre 2009	Invited lecture: “ <i>Improvement of Kohonen-based learning by three way methods</i> ”
2010	VII Winter symposium on chemometrics - WSC7, San Pietroburgo (Russia), 15-19 febbraio 2010	Invited plenary lecture: “ <i>Particle swarm optimization (PSO) – a potentially useful tool in chemometrics?</i> ”
2010	II Workshop Applicazioni della Risonanza magnetica nella scienza degli alimenti, Roma, 27-28 maggio 2010.	Invited plenary lecture: “ <i>Strumenti chemiometrici per l’elaborazione dei dati NMR</i> ”
2010	CMA4CH10 – Use of multivariate analysis and chemometrics in cultural heritage and environment, Taormina, 26-29 settembre 2010	Invited plenary lecture: “ <i>Three-way methods for the analysis of hyphenated chromatographic data</i> ”
2011	International Conference on Perspectives in Chemometrics – ICOPIC2011, Chennai (India), 9-11 aprile 2011	Invited plenary lecture: “ <i>Classification methods in chemometrics</i> ”
2011	Euroanalysis XVI, Belgrado (Serbia), 11-15 settembre 2011	Invited lecture: “ <i>Tracing the origin of foodstuff: a chemometric challenge</i> ”
2011	Conferentia Chemometrica 2011, Sümeg (Ungheria), 18-21 settembre 2011	Invited lecture: “ <i>Particle Swarm Optimization (PSO) algorithms in chemometrics: theory and applications</i> ”
2011	New Trends in Chemometrics and Applications – NTCA2011, Side-Antalya (Turchia), 8-11 ottobre 2011	Invited lecture: “ <i>Coupling infrared spectroscopy and chemometrics for food and drug authentication</i> ”
2012	CMA4CH12 – Use of multivariate analysis and chemometrics in cultural heritage and environment, Roma, 27-30 maggio 2012	Invited plenary lecture: “ <i>Coupling Chemometrics and NIR Spectroscopy for Food and Drug Authentication</i> ”

2012	4th EuCheMS Chemistry Congress, Praga (Repubblica Ceca), 26-30 agosto 2012	Invited lecture: <i>“Application of nature-inspired methods in chemometrics”</i>
2012	IASIM12, Sigurda&Jurmala (Lettonia) 9-14 settembre 2012	Invited plenary workshop: <i>“Multivariate classification”</i>
2012	Chimiometrie 2012, Villeneuve d’Ascq (Francia), 5-6 dicembre 2012	Invited plenary lecture: <i>“Multi-way methods for regression and classification”</i>
2012	I Giornata di chemiometria applicata alle scienze farmaceutiche, Salerno, 19 dicembre 2012	Invited lecture: <i>“Calibration and classification”</i>
2013	13th Scandinavian Symposium on Chemometrics (SSC13), Djurönäset (Svezia), 17–20 giugno 2013	Invited plenary workshop: <i>“Clustering and classification”</i>
2013	Advances in Latent Variable. Methods, Models and Applications (SIS 2013 Statistical Conference), Brescia, 19-21 giugno 2013	Invited lecture: <i>“SCREAM: A novel multi-way method for regression on tensors with shifts along one mode”</i>
2013	Conferentia Chemometrica 2013, Sopron (Ungheria), 8-11 settembre 2013	Invited lecture: <i>“Local Classification by Locally Weighted – PLS-DA”</i>
2013	Second International Conference on New Trends in Chemometrics and Applications (NTCA-2013). Ankara, Turchia, 23-28 ottobre 2013	Invited plenary lecture: <i>“Non-linear modeling for classification, regression and optimization”</i>
2014	II Giornata di chemiometria applicata alle scienze farmaceutiche, Salerno, 11 febbraio 2014	Invited lecture: <i>“Chemometrics for omics disciplines: strategies, methodologies, validation”</i>
2014	3 rd Annual conference and EXPO of AnalytiX-2014, Dalian (Cina), 25-28 aprile 2014	Invited lecture: <i>“Locally Weighted PLS-DA: A New and Versatile Tool for Non-linear Classification”</i>
2014	NIR hyperspectral imaging applications and future developments, Umeå (Svezia), 20 maggio 2014.	Invited lecture: <i>“Chemometrics under a new light: classification and validation revisited through hyperspectral image analysis”</i>
2014	5 th CMA4CH Mediterranean Meeting, Roma, 14-17 dicembre 2014	Invited plenary lecture: <i>“Chemometric methods for the analysis of data coming from designed experiments”</i>
2015	2nd International Conference on Perspectives in Chemometrics (ICOPI2015), Chennai (India), 9-12 febbraio 2015	Invited plenary lecture: <i>“Analyzing multivariate data coming from designed experiments: a chemometric journey”</i>
2015	4th Annual Conference and EXPO of AnalytiX-2015, Nanjing (Cina), 25-28 aprile 2015	Invited lecture: <i>“Metabolomics from a chemometrics standpoint”</i>
2015	XV Chemometrics in Analytical Chemistry (CAC2015), Changsha (Cina), 22-26 giugno 2015	Invited keynote lecture: <i>“Novel strategies for non-linear modeling”</i>

2015	Euroanalysis XVIII, Bordeaux (Francia), 6-10 settembre 2015.	Invited keynote lecture: “ <i>Advanced chemometric strategies for food authentication</i> ”
2015	SciX2015, Providence (USA), 27 settembre-2 ottobre 2015	Invited lecture: “ <i>Advanced chemometric strategies for food authentication (quality control and characterization)</i> ”
2015	Tecniche analitiche di spettroscopia molecolare per il settore agroindustriale, Roma, 27 ottobre 2015	Invited lecture: “ <i>Accoppiamento di spettroscopia NIR e chemiometria per il controllo di qualità in ambito alimentare</i> ”
2015	5th Biennial Iranian Chemometrics Conference, Tehran (Iran), 25-26 novembre 2015	Invited plenary lecture: “ <i>Applications of Particle swarm optimization (PSO) in chemometrics</i> ”
2016	Third International Conference on New Trends in Chemometrics and Applications (NTCA-2016). Side-Antalya, Turchia, 23-28 maggio 2016.	Invited plenary lecture: “ <i>Applications of Particle swarm optimization (PSO) in chemometrics</i> ”
2016	International Symposium Standardisation of non-targeted methods for food authentication, Berlino (Germania), 28-29 novembre 2016	Invited lecture: “ <i>Validation of Chemometric Models and Aspects of Data Fusion</i> ”
2016	6 th CMA4CH Mediterranean Meeting, Roma, 18-19 dicembre 2016	Invited plenary lecture; “ <i>Multivariate classification methods: A gentle introduction</i> ”
2017	III Giornata di chemiometria applicata alle scienze farmaceutiche, Salerno, 14 febbraio 2017	Invited lecture: “ <i>Approcci chemiometrici per le scienze omiche</i> ”
2017	5th Annual Conference of AnalytiX-2017, Fukuoka (Giappone), 22-24 marzo 2017	Invited lecture: “ <i>Strategies for non-linear modeling</i> ”
2017	Topics in Chemometrics 2017 (TIC2017), Newcastle (Australia), 18-21 aprile 2017	Invited lecture: “ <i>Analyzing data from designed experiments: ASCA, ANOVA-TP and beyond</i> ”
2017	CAMO Futures, Glasgow (UK), 31 maggio-1 giugno 2017	Invited keynote lecture: “ <i>Successful applications of Particle swarm optimization (PSO) in chemometrics</i> ”
2017	Conferentia Chemometrica 2017, Gyögyös-Farkasmály (Ungheria), 3-6 settembre 2017	Invited lecture: “ <i>Local regression and classification: oldtimers and new-comers</i> ”
2017	SciX2017, Reno (USA), 8-13 ottobre 2017	Invited lecture: “ <i>Multivariate methods for analyzing designed data</i> ”
2017	International Workshop Environmental Omics Integration & Modelling, Barcelona (Spagna), 18-20 ottobre 2017.	Invited plenary lecture: “ <i>Approaches for the analysis of designed metabolomic data</i> ”

2017	Les 18èmes Rencontres HélioSPIR, Montpellier (Francia), 27-28 novembre 2017	Invited plenary lecture: <i>“Discrimination and classification in NIR spectroscopy”</i>
2018	Chimiometrie 2018, Parigi (Francia), 30-31 gennaio 2018	Invited plenary lecture: <i>“Chemometric strategies for analyzing multivariate data coming from designed experiments: an overview”</i>
2018	6th Annual Conference of AnalytiX-2018, Miami (USA), 26-28 marzo 2018	Invited lecture: <i>“Integrating analytical data from multiple sources by different fusion strategies”</i>
2018	Tecniche Chimiometriche e Strumentali di supporto all'Analisi Sensoriale e all'Agricoltura di Precisione, Salerno, 17 maggio 2018	Invited lecture: <i>“Advanced chemometric tools for precision agriculture”</i>
2018	IV Giornata di Chimiometria applicata alle Scienze Farmaceutiche, Salerno, 18 maggio 2018	Invited lecture: <i>“What’s in chemometrics for the (pharmaceutical) chemist?”</i>
2018	XVII Chemometrics in Analytical Chemistry (CAC2018), Halifax (Canada), 25-29 giugno 2015	Invited plenary lecture: <i>“PLS-DA: One, none and a hundred thousand”</i>
2018	SciX2018, Atlanta (USA), 21-26 ottobre 2018	Invited lecture: <i>“Particle Swarm Optimization (PSO) in chemometrics: an overview”</i>
2018	The 3rd Aquaphotomics International Symposium, Awaji (Giappone), 2-5 dicembre 2018	Invited plenary workshop: <i>“Chemometric tools for aquaphotomics”</i>
2019	7th Annual Conference of AnalytiX-2018, Singapore (Singapore), 12-14 aprile 2019	Invited lecture: <i>“Class-modeling tools and their application to analytical chemistry”</i>
2019	4th International Conference on New Trends in Chemometrics and Applications (NTCA-2019), Didim (Turchia), 30 aprile-4 maggio 2019	Invited plenary lecture: <i>“Advanced chemometric approaches for the analysis of multi-block data”</i>
2019	Topics in Chemometrics 2019 (TIC2019), Szeged (Ungheria), 15-18 maggio 2019	Invited lecture: <i>“Non-linear modeling by local approaches (multivariate, multi-way and multi-block data)”</i>
2019	6 th International Symposium on Applications of Modelling as an Innovative Technology in the Horticultural Supply Chain (Model-IT), Molfetta, 9-12 giugno 2019	Invited keynote lecture: <i>“Good vibrations: combining chemometric tools with IR spectroscopy and imaging”</i>
2019	10th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (ICAVS 10), Auckland (Nuova Zelanda), 7-12 luglio 2019	Invited lecture: <i>“Advanced chemometric tools for the analysis of vibrational spectra”</i>
2019	Workshop on machine learning and chemometrics in biospectroscopy	Invited lecture: <i>“Advanced chemometric tools for the analysis of spectral data”</i>

	BioSpecMLC 2019), Minsk (Bielorussia), 18-21 agosto 2019	
2019	Euroanalysis XX. Istanbul, Turchia, 31 agosto – 5 settembre 2019	Invited keynote lecture: “ <i>Class modeling: an underused approach in analytical chemistry</i> ”
2019	SciX2019, Palm Springs (USA), 13-18 ottobre 2019	Invited lectures: “ <i>Coupling variable selection and multi-block predictive modeling through the SO-CovSel algorithm</i> ” and “ <i>Improving preprocessing of spectral data by the VSN (variable sorting for normalization) algorithm</i> ”
2020	Machine learning meets chemistry, Torino, 17-18 febbraio 2020	Invited lecture: “ <i>Chemometrics and machine learning in analytical chemistry: interplay and differences</i> ”
2021	The 4th Aquaphotomics International Symposium, Kobe (Giappone), 20-22 marzo 2021	Invited plenary workshop: “ <i>A closer look at preprocessing with focus on aquaphotomics</i> ” (presentazione via Zoom)

IXb – Organizzazione di conferenze, workshop e scuole

Anno	Evento (luogo, data)	Ruolo
2010	CMA4CH10 – Use of multivariate analysis and chemometrics in cultural heritage and environment, Taormina, 26-29 settembre 2010	Membro del comitato scientifico
2011	Workshop di Chemiometria 2011, Albano Laziale, 26-28 Maggio 2011	Chairman
2012	8th Winter Symposium on Chemometrics, Drakino (Russia), 27 febbraio-2 marzo 2012	Membro del comitato organizzatore
2012	CMA4CH12 – Use of multivariate analysis and chemometrics in cultural heritage and environment, Roma, 27-30 maggio 2012	Membro del comitato scientifico
2012	2 nd African-European Conference on Chemometrics (Afrodata 2012). Stellenbosch, Sudafrica, 19-23 Novembre 2012	Membro del comitato scientifico
2013	1 st Multi-way/set/level/block school, Roma, 30 aprile-3 maggio 2013	Co-organizzatore insieme alla prof.ssa Marina Cocchi (Università di Modena e Reggio Emilia)
2013	13th Scandinavian Symposium on Chemometrics (SSC13), Djurönäset (Svezia), 17–20 giugno 2013	Membro del comitato scientifico
2013	VIII Colloquium Chemiometricum Mediterraneum, Bevagna, 30 giugno-4 luglio 2013	Membro del comitato scientifico

2014	9th Winter Symposium on Chemometrics, Tomsk (Russia), 17-22 febbraio 2014	Membro del comitato organizzatore
2014	Arctic Analyses, Ilulissat (Groenlandia), 10-13 Marzo 2014	Co-chairman insieme al prof. Rasmus Bro, (Università di Copenhagen), al prof. Age Smilde (Università di Amsterdam) e al prof. Tormod Naes (NOFIMA)
2014	IASIM-14 – Fifth Conference in Spectral Imaging, Roma, 3-5 dicembre 2014	Co-chairman insieme al dr. Paolo Oliveri (Università di Genova)
2014	5 th CMA4CH Mediterranean Meeting, Roma, 14-17 dicembre 2014	Membro del comitato scientifico
2015	Workshop di Chemiometria 2015, Roma, 25-27 febbraio 2015	Chairman
2015	Three-way methods In Chemistry And Psychology (TRICAP) 8 th edition, Zoldo, 31 maggio - 5 giugno 2015	Co-chairperson insieme alla prof.ssa Marina Cocchi (Università di Modena e Reggio Emilia)
2015	14th Scandinavian Symposium of Chemometrics (SSC14), Chia Laguna, 14-17 giugno 2015	Membro del comitato scientifico
2015	XV Chemometrics in Analytical Chemistry (CAC2015), Changsha (Cina), 22-26 giugno 2015	Membro del comitato scientifico
2016	10th Winter Symposium on Chemometrics, Samara (Russia), 29 febbraio-4 marzo 2016	Membro del comitato organizzatore
2016	Third International Conference on New Trends in Chemometrics and Applications (NTCA-2016). Side-Antalya, Turchia, 23-28 maggio 2016	Membro del comitato scientifico
2016	XVI Chemometrics in Analytical Chemistry (CAC2016), Barcelona (Spagna), 6-10 giugno 2016	Membro del comitato scientifico
2016	IASIM-16 – Sixth Conference in Spectral Imaging, Chamonix (Francia), 3-6 luglio 2016	Membro del comitato scientifico
2016	7 Simposio Italiano di Spettroscopia NIR (NIRItalia 2016), Milano, 12-14 ottobre 2016	Membro del comitato scientifico
2016	Mini-Arctic 2016, Groningen (Olanda), 10-11 novembre 2016	Membro del comitato organizzatore
2016	6 th CMA4CH Mediterranean Meeting, Roma, 18-19 dicembre 2016	Membro del comitato scientifico
2017	18 th International Conference on Near Infrared Spectroscopy (ICNIRS 2017), Copenhagen (Danimarca), 11-15 giugno 2017	Membro del comitato scientifico

2017	15th Scandinavian Symposium of Chemometrics (SSC15), Naantali (Finlandia), 19-22 giugno 2017	Membro del comitato scientifico
2017	9th Colloquium Chemiometricum Mediterraneum, Arles (Francia), 27-30 giugno 2017	Membro del comitato scientifico
2017	Summer School on Image Analysis and Hyperspectral Imaging, Roma 20-22 settembre 2017	Co-organizzatore e membro del comitato scientifico
2017	Mini-Arctic 2017, Valencia (Spagna), 9-10 novembre 2017	Membro del comitato organizzatore
2018	11th Winter Symposium on Chemometrics, San Pietroburgo (Russia), 26 febbraio-2 marzo 2018	Membro del comitato organizzatore
2018	Arctic Analyses II, Fludir (Islanda), 16-19 aprile 2018	Co-chairperson insieme al prof. Rasmus Bro, (Università di Copenhagen), al prof. Age Smilde (Università di Amsterdam) e alla dr.ssa Ingrid Måge (NOFIMA).
2018	8 Simposio Italiano di Spettroscopia NIR (NIRItalia 2018), Genova, 30-31 maggio 2018	Membro del comitato scientifico
2019	4th International Conference on New Trends in Chemometrics and Applications (NTCA-2019), Didim (Turchia), 30 aprile-4 maggio 2019	Membro del comitato scientifico
2019	10th Colloquium Chemiometricum Mediterraneum, Menorca (Spagna), 12-14 giugno 2019	Membro del comitato scientifico
2019	16th Scandinavian Symposium of Chemometrics (SSC16), Oslo (Norvegia), 17-20 giugno 2019	Membro del comitato scientifico
2019	Mini-Arctic 2019, Civita di Bagnoregio, 24-25 ottobre 2019	Chairman
2020	XVIII Chemometrics in Analytical Chemistry (CAC2020), Courmayeur (Italia)/Chamonix (Francia), 21-26 giugno 2020. Conferenza rinviata al 2022 per l'emergenza Covid-19	Co-chairman insieme al prof. Cyril Ruckebusch (University of Lille)

Parte X – Finanziamenti

Anno	Titolo/Ruolo	Ente/Programma	Finanziamento
2008	Chemometric methods for the modelling of multidimensional chromatographic data (CHEMULCHROM). Ruolo: PI	Bando per la FAttibilità di progetti di Ricerca & Innovazione 2008 (FARI 2008). Università di Roma "La Sapienza"	7000 €

2010	COMICS – Chemometrics for OMICS data (prot. C26I10BCS7). Ruolo: PI	Bando FARI 2010. Università di Roma “La Sapienza”	7500 €
2010	Sviluppo di metodi chemiometrici per l'interpretazione di dati analitici (prot. C26A10BZTL). Ruolo: PI	Ricerche Universitarie 2010. Università di Roma “La Sapienza”	15000 €
2012	VIII Colloquium Chemiometricum Mediterraneum (prot. C26C12L8KL). Ruolo: Proponente	Congressi e convegni - anno 2013. Università di Roma “La Sapienza”	2500 €
2012	Sviluppo di metodi chemiometrici e loro applicazione a problematiche di interesse alimentare (prot. C26A12KJAM). Ruolo: PI	Ricerche Universitarie 2012. Università di Roma “La Sapienza”	12000 €
2013	Metodi analitici innovativi basati sulla chemiometria per la valutazione della qualità alimentare (prot. C26A13ZSAM). Ruolo: PI	Ricerche Universitarie 2013. Università di Roma “La Sapienza”	6800 €
2014	Accoppiamento di metodi chemiometrici innovativi alla spettroscopia nel vicino infrarosso (NIR) per la caratterizzazione rapida e non distruttiva di matrici complesse (prot. C26A14YTEC). Ruolo: PI	Ricerche Universitarie 2014. Università di Roma “La Sapienza”	10000 €
2014-2016	The European Nutrition Phenotype Assessment and Data Sharing Initiative (ENPADASI) – EoL 41 (prot. MIUR 2027 del 11/09/2015). Ruolo: PI dell'Unità di ricerca Sapienza	JPI “Healthy diet for a healthy life (JPI-HDHL). EU tramite MIUR	11000 € (quota Sapienza)
2015	Sviluppo e applicazione di metodi chemiometrici avanzati per il controllo di qualità degli alimenti (prot. C26A15WFKK). Ruolo: PI	Ricerche Universitarie 2015. Università di Roma “La Sapienza”	11500 €
2015-2017	BIOMarkers associated with Sarcopenia and PHysical frailty in EldeRly pERsons: the BIOSPHERE study (delibera Fondazione Roma 29/01/2015). Ruolo: PI dell'Unità di ricerca Sapienza	Grants for Biomedical Research: Non Communicable Diseases (NCDs) – call 2013. Fondazione Roma	41700 € (quota Sapienza)
2016	High resolution NMR spectroscopy: from molecular structure to foods, nutrition and human health (prot. GA116154C97DAC68). Ruolo: Co-proponente	Grandi Attrezzature Scientifiche 2016. Università di Roma “La Sapienza”	660000 €
2017	Sviluppo ed applicazione di metodi chemiometrici avanzati per l'analisi di immagini iperspettrali (prot. RM11715C81CAEE81). Ruolo: PI	Progetti di ricerca (piccoli, medi) 2017. Università di Roma “La Sapienza”	12500 €

2017-2019	Herramientas quimiométricas para mejorar la toma de decisiones enmarcadas en la tecnología analítica de procesos y en seguridad alimentaria (grant nr. BU012-P17). Ruolo: Componente	Programa de apoyo a proyectos de investigación, cofinanciadas por el FEDER. Junta de Castilla y Leon (Spagna)	120000 €
2018-2021	New chemometric tools with latent variables for decision making in process analytical technology and in regulated framework of food safety (grant nr. CTQ2017-88894-R). Ruolo: Componente	Programa Estatal de I+D+i Orientada a los Retos de la Sociedad. Ministerio de Economía, Industria y Competitividad (Spagna)	68970 €
2018	Metodi chemiometrici avanzati per l'analisi di dati multi-block e loro applicazione in ambito bio-medico (prot. RM1181643593B241). Ruolo: PI	Progetti di ricerca (piccoli, medi) 2018. Università di Roma "La Sapienza"	15000 €
2018	Studio, caratterizzazione e valorizzazione di prodotti a supporto dell'industria sui temi della qualità e della sostenibilità. Potenziamento di un sistema analitico per spettrometria di massa a singolo quadrupolo (GC-MS) con tecnica SPME (prot. MA11816436AAE192). Ruolo: Componente	Medie Attrezzature Scientifiche 2018. Università di Roma "La Sapienza"	30000 €
2019	Untargeted analytical approach by high resolution mass spectrometry to study metabolites and new/unexpected compounds in Antarctica (prot. RG11916B7A70EABF). Ruolo: Componente	Progetti di ricerca grandi 2019. Università di Roma "La Sapienza"	40000 €
2019	XVIII Chemometrics in Analytical Chemistry - CAC2020 (prot. CC11916B88511A65). Ruolo: Responsabile	Finanziamenti per convegni, seminari, workshop 2019. Università di Roma "La Sapienza"	1600 €
2019-oggi	Cutting Edge Analytical Chemistry Methodologies and Bio-Tools to Boost Precision Medicine in Hormone-Related Diseases (prot. 2017Y2PAB8). Ruolo: Componente dell'Unità di Ricerca Sapienza.	PRIN 2017. MIUR	136877 € (quota Sapienza; finanziamento totale: 671100 €)
2020	Intravital two-photon microscopy coupled with electrophysiology setup: a unique tool to longitudinally study cell morphology and function in awake animal models (prot.	Grandi Attrezzature Scientifiche 2020. Università di Roma "La Sapienza"	546077 €

	GA12017304B57367). Componente	Ruolo:	
2020	Strumenti chemiometrici avanzati a supporto di approcci non-distruttivi alla valutazione della qualità di prodotti agro-alimentari (prot. RP120172B958C448). Ruolo: PI	Progetti di ricerca (piccoli, medi) 2020. Università di Roma "La Sapienza"	4000 €
2020	Visita del prof. Age Smilde, Università di Amsterdam (prot. C26V204HH2). Ruolo: Proponente	Professori visistatori per la ricerca 2020. Università di Roma "La Sapienza"	5000 €
2021-2023	Nuevos desarrollos metodológicos del diseño de experimentos para análisis químicos, bioquímicos y en tecnología analítica de procesos (grant nr. BU052-P20). Ruolo: Componente	Programa de apoyo a proyectos de investigación, cofinanciadas por el FEDER. Junta Castilla y León (Spagna)	264000 €
2021-2025	Se-bioFORtified ALfaLfa for Se-enriched Dairy products - Se4all (grant agreement nr. 101007630). Ruolo: PI dell'Unità di ricerca Sapienza	MSCA-RISE-2020 - Research and Innovation Staff Exchange. European Commission (Horizon 2020)	50600 € (quota Sapienza; finanziamento totale: 662400 €)

Parte XI – Descrizione dell'attività di ricerca

Parole chiave

Chemiometria (Chemometrics)
Chimica Analitica (Analytical Chemistry)
Spettroscopia (Spectroscopy)
Sviluppo di metodi (method development)
Metabolomica (Metabolomics)

Breve descrizione

<p>Il mio lavoro di ricerca si concentra principalmente su tutti i diversi aspetti della chemiometria, in particolare per quanto riguarda sia la progettazione e lo sviluppo di nuovi metodi e algoritmi che l'applicazione di modelli per risolvere problemi reali. In particolare, le principali aree in cui si articola il mio lavoro di ricerca sono:</p> <p><i>A. Sviluppo di nuovi metodi per il controllo della qualità dei prodotti alimentari e farmaceutici.</i></p> <p>Una parte sostanziale della mia ricerca si è concentrata sulla possibilità di utilizzare proficuamente l'accoppiamento tra diverse tecniche analitiche strumentali e opportuni strumenti chemiometrici per lo sviluppo di metodi di analisi innovativi in campo alimentare e farmaceutico. In particolare, l'obiettivo è stato quello di sfruttare tutto il potenziale derivante dall'utilizzo della chemiometria al fine di sviluppare metodologie il più possibile non invasive/non distruttive, che possano richiedere l'utilizzo di una quantità limitata di reagenti, se non addirittura la loro totale assenza, e che, nella maggior parte dei casi, non prevedano alcun pretrattamento del campione, consentendo un notevole risparmio in termini di tempi e costi di analisi e risultando perfettamente in linea con i principi della chimica verde. In questo contesto, dal punto di vista analitico, particolarmente efficace risulta l'impiego di diverse tecniche spettroscopiche - principalmente nella regione dell'infrarosso.</p>

B. Metabolomica e Proteomica

Gli ultimi anni hanno visto l'emergere, nell'ambito delle scienze della vita, di concetti come genomica, proteomica o metabolomica/metabonomica. In questo contesto, l'acquisizione automatizzata di grandi quantità di dati -omici rappresenta una sfida in termini di esplorazione e interpretazione. L'abbondanza di dati non è di per sé garanzia di ottenere informazioni utili sui principali eventi che avvengono in un sistema indagato. Al contrario, i dati -omici devono essere elaborati e analizzati, al fine di evidenziare le informazioni rilevanti, incorporate nelle misure. Poiché questi dati sono di natura altamente multivariata, è necessario utilizzare tecniche di analisi dei dati in grado di affrontare le sfide inerenti a tali grandi masse di dati, in particolare rumore, collinearità e osservazioni mancanti. Solo con un'attenta analisi dei dati, si può essere in grado di affrontare questioni chiave come gli effetti del trattamento sul metabolismo di un paziente o l'identificazione di biomarcatori. Una parte del mio lavoro di ricerca si colloca in questo quadro e, attraverso la collaborazione con diversi gruppi di ricerca nazionali ed internazionali, prevede l'utilizzo di differenti metodi chemiometrici per studi metabolomici e proteomici.

C. Sviluppo di nuovi metodi chemiometrici

La mia ricerca non si limita solo all'applicazione di metodi chemiometrici già esistenti per risolvere problemi reali di diversa natura, ma una parte di essa è anche focalizzata sulla progettazione, lo sviluppo e la messa a punto di metodi innovativi. In particolare, da un lato, l'interesse è stato rivolto alla classe di algoritmi genericamente denominati "nature-inspired" (ovvero, il cui funzionamento è ispirato a modelli biologici e/o socio-comportamentali). Questo ha portato allo sviluppo di nuove architetture di reti neurali artificiali che fossero adatte a risolvere specifici problemi in ambito chimico analitico e all'introduzione, in ambito chemiometrico, di algoritmi di swarm intelligence, quali particle swarm optimization (PSO).

Parallelamente, l'interesse è stato rivolto alla possibilità di estrarre la massima informazione da dati multivariati raccolti sulla base di una progettazione razionale degli esperimenti (Experimental design) e allo sviluppo di nuovi metodi multi-way (cioè quei metodi che sono in grado di trattare i casi in cui, per ogni campione, sia registrato un segnale bidimensionale o di ordine superiore).

Infine, negli ultimi anni la mia attività di ricerca si è concentrata sullo sviluppo di nuovi approcci chemiometrici per l'integrazione di diverse matrici di dati (ad esempio, segnali raccolti sugli stessi campioni attraverso diverse tecniche strumentali).

Parte XII – Principali collaborazioni nazionali ed internazionali

Istituzione	Collaboratori	Nr. Lavori*
Università degli studi de L'Aquila	Alessandra Biancolillo, Angelo A. D'Archivio	33

Fondazione Policlinico Universitario A. Gemelli IRCCS/Università Cattolica del Sacro Cuore	Riccardo Calvani, Emanuele Marzetti, Anna Picca, Jacopo Gervasoni, Francesco Landi, Roberto Bernabei	22
INRAE (ex IRSTEA), Montpellier (Francia)	Jean Michel Roger	13
Department of Food Science, University of Copenhagen (Danimarca)	Rasmus Bro, Thomas Skov, José Manuel Amigo	7
Wagenigen Food and Biobased Research, University of Wagenigen (Olanda)	Puneet Mishra	7
Université Paris-Saclay (Francia)	Douglas N. Rutledge, Delphine Jouan-Rimbaud-Bouveresse	7
University of Silesia (Polonia)	Beata Walczak	10
Università di Roma “La Sapienza”, Dipartimento di Biologia Ambientale	Alfredo Miccheli	18
Department of Food Science, University of Stellenbosch (Sudafrica)	Marena Manley, Paul Williams, Dalene De Beer, Elizabeth Joubert	6
Università di Modena e Reggio Emilia, Dipartimento di Chimica	Marina Cocchi	4
Ospedale Pediatrico Bambino Gesù IRCCS, Unità di Ricerca di Microbioma Umano	Lorenza Putignani, Federica Del Chierico, Pamela Vernocchi	6
Università di Roma “La Sapienza”, Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco	Luisa Mannina	9
University of Lille, LASIR (Francia)	Cyril Ruckebusch, Raffaele Vitale	5
University College Dublin (Irlanda)	Aoife Gowen	5
Università di Roma “La Sapienza”, Dipartimento di Management	Maurizio Boccacci Mariani, Vanessa Giannetti	5
University of Texas at Austin, Dept. of Chemistry (USA)	Eric V. Anslyn	2
University of Belgrade (Serbia)	Slavica Ražić	1
IDAEA-CSIC (Spagna)	Roma Tauler	3
University of Amsterdam (Olanda)	Age Smilde	1
University of Burgos (Spagna)	Luis Sarabia, Maria Cruz Ortiz	1
INAIL	Giovanna Tranfo	3
Università di Torino, Dipartimento di Chimica	Marco Vincenti, Eugenio Alladio	2
Dipartimento di Scienze Agrarie, degli Alimenti e dell'Ambiente, Università di Foggia	Maria Luisa Amodio, Giancarlo Colelli	1
Istituto di Struttura della Materia, Consiglio Nazionale delle Ricerche (ISM-CNR)	Julietta Rau	2
University of Shahrekord (Iran)	Shima Ghavanati Nasab	2
University of Bristol (UK)	Richard G. Brereton	3

Department of Veterinary Clinical Sciences, College of Veterinary Medicine, Purdue University (USA)

Sarah Malek

1

*Numero complessivo di lavori in collaborazione con almeno un ricercatore dell'Istituzione

Parte XIII – Riassunto della produzione scientifica

Tipo di prodotto	Numero	Data Base	Inizio	Fine
Articoli	186	Scopus	2002	2021
Capitoli di libro	17	Scopus	2002	2021
Proceedings su volume indicizzato	7	Scopus	2002	2021

Numero complessivo di lavori	210 (fonte: Scopus)
Numero complessivo di lavori negli ultimi 10 anni (2011-2021)	173 (fonte: Scopus), di cui: - 154 Articoli - 15 Capitoli di libro - 4 Proceedings su volume indicizzato
Impact Factor (IF) totale*	637.887 (fonte: InCites Journal Citation Report)
Impact Factor (IF) medio*	3.04 (fonte: InCites Journal Citation Report)
Numero totale di citazioni	4388 (fonte: Scopus)
Numero totale di citazioni (escludendo le autocitazioni)	3877 (fonte: Scopus)
Numero medio di citazioni**	20.90 (fonte: Scopus)
Numero medio di citazioni (escludendo le autocitazioni)**	18.46 (fonte: Scopus)
Hirsch (H) index	34 (fonte: Scopus)
Hirsch (H) index (escludendo le autocitazioni)	32 (fonte: Scopus)
Hirsch (H) index degli ultimi 15 anni	33 (fonte: Scopus)
Normalized H index***	1.7 (fonte: Scopus)

* Calcolato in relazione all'anno di pubblicazione o, se non disponibile, a quello più vicino

** diviso per il totale dei prodotti (numero articoli + capitoli di libri + proceedings indicizzati), ovvero 210

*** H-index normalizzato per l'età accademica, definita dalla data della prima pubblicazione scientifica (cfr. delibera ANVUR n. 50 del 21/06/2012)

Parte XIV – Pubblicazioni selezionate per la valutazione

Lista delle 16 pubblicazioni selezionate per la valutazione. Per ciascuna pubblicazione sono anche indicate l'Impact factor della rivista calcolato in relazione all'anno di pubblicazione o, se non disponibile, a quello più vicino (fonte: InCites Journal Citation Report) ed il numero di citazioni (fonte: Scopus).

- S01 F. Marini, J. Zupan, A.L. Magri, “On the use of counterpropagation artificial neural networks to characterize Italian rice varieties”, *Anal. Chim. Acta*, 510 (2004), 231-240. IF (2004): 2.588; citazioni: 35; **primo autore e corresponding author**.
- S02 F. Marini, A.L. Magri, F. Balestrieri, F. Fabretti, D. Marini, “Supervised pattern recognition applied to the discrimination of the floral origin of italian honey samples”, *Anal. Chim. Acta*, 515 (2004), 117-125. IF (2004): 2.588; citazioni: 67; **primo autore e corresponding author**.
- S03 F. Marini, J. Zupan, A.L. Magri, “Class-modeling using Kohonen artificial neural networks”, *Anal. Chim. Acta*, 544 (2005), 306-314. IF (2005): 2.760; citazioni: 50; **primo autore e corresponding author**.
- S04 F. Marini, A.L. Magri, R. Bucci, A.D. Magri, “Use of different artificial neural networks to resolve binary blends of monocultivar italian olive oils”, *Anal. Chim. Acta*, 599 (2007), 232-240. IF (2007): 3.186; citazioni: 55; **primo autore e corresponding author**.
- S05 F. Marini, “Artificial neural networks in food analysis: trends and perspectives. A review”, *Anal. Chim. Acta*, 635 (2009), 121-131. IF (2009): 3.757; citazioni: 138; **unico autore e corresponding author**.
- S06 M. Bevilacqua, R. Bucci, A.D. Magri, A.L. Magri, F. Marini, “Tracing the origin of extra virgin olive oils by infrared spectroscopy and chemometrics: A case study”, *Anal. Chim. Acta*, 717 (2012), 39-51. IF (2012): 4.387; citazioni: 73; **ultimo autore e corresponding author**.
- S07 M. Bevilacqua, R. Bucci, S. Materazzi, F. Marini, “Application of near infrared (NIR) spectroscopy coupled to chemometrics for dried egg-pasta characterization and egg content quantification”, *Food Chem.*, 140 (2013) 726-734. IF (2013): 3.259; citazioni: 44; **ultimo autore e corresponding author**.
- S08 A. Biancolillo, R. Bucci, A.L. Magri, A.D. Magri, F. Marini, “Data-fusion for multiplatform characterization of an italian craft beer aimed at its authentication”, *Anal. Chim. Acta*, 820 (2014), 23-31. IF (2014): 4.513; citazioni: 133; **ultimo autore e corresponding author**.
- S09 M. Bevilacqua, F. Marini, “Local classification: Locally weighted-partial least squares-discriminant analysis (LW-PLS-DA)”, *Anal. Chim. Acta*, 838 (2014) 20-30. IF (2014): 4.513; citazioni: 27; **ultimo autore**.
- S10 F. Marini, D. de Beer, E. Joubert, B. Walczak, “Analysis of variance of designed chromatographic data sets: The Analysis of Variance-Target Projection approach”, *J. Chromatogr. A*, 1405 (2015) 94-102. IF (2015): 3.926; citazioni: 27; **primo autore**.
- S11 F. Marini, B. Walczak, “Particle swarm optimization (PSO). A tutorial”, *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, 149 (2015) 153-165. IF (2015): 2.217; citazioni: 358; **primo autore e corresponding author**.
- S12 F. Marini, D. de Beer, N.A. Walters, A. de Villiers, E. Joubert, B. Walczak, “Multivariate analysis of variance of designed chromatographic data. A case study involving fermentation of rooibos tea”, *J. Chromatogr. A*, 1489 (2017) 115-125. IF (2017): 3.716; citazioni: 5; **primo autore**.

S13 R. Vitale, F. Marini, C. Ruckebusch, "SIMCA modeling for overlapping classes: fixed or optimized decision threshold?", *Anal. Chem.*, **90** (2018) 10738-10747. IF (2018): 6.350; citazioni: 16.

S14 B.T. Herrera, S.R. Moor, M. McVeigh, E.K. Roesner, F. Marini, E.V. Anslyn, "Rapid Optical Determination of Enantiomeric Excess, Diastereomeric Excess, and Total Concentration Using Dynamic-Covalent Assemblies: A Demonstration Using 2-Aminocyclohexanol and Chemometrics", *J. Am. Chem. Soc.*, **141** (2019) 11151-11160. IF (2019): 14.612; citazioni: 9; **corresponding author**.

S15 P. Firmani, R. Vitale, C. Ruckebusch, F. Marini, "ANOVA-Simultaneous Component analysis modelling of low-level-fused spectroscopic data: A food chemistry case-study", *Anal. Chim. Acta*, **1125** (2020) 308-314. IF (2019): 5.977; citazioni: 3; **ultimo autore**.

S16 P. Leogrande, F. Botrè, X.D.L. Torre, D. Jardines, M.K. Parr, F. Marini, "Coupling high-resolution mass spectrometry and chemometrics for the structural characterization of anabolic-androgenic steroids and the early detection of unknown designer structures", *Talanta*, **227** (2021) 122173. IF (2019): 5.339; citazioni: 0; **ultimo autore**.

Parte XV – Elenco completo delle Pubblicazioni

XVa – Articoli

P01 R. Bucci, A.D. Magrì, A.L. Magrì, D. Marini, F. Marini, "Chemical authentication of extra-virgin olive oil varieties by supervised chemometric procedures", *J. Agric. Food Chem.*, **50** (2002), 413-418

P02 R. Bucci, A.D. Magrì, A.L. Magrì, F. Marini, "Comparison of three spectrophotometric methods for the determination of γ -oryzanol in rice bran oil", *Anal. Bioanal. Chem.*, **375** (2003), 1254-1259

P03 F. Marini, F. Balestrieri, R. Bucci, A.L. Magrì, D. Marini, "Supervised pattern recognition to discriminate the geographical origin of rice bran oils: a first study", *Microchem. J.*, **74** (2003), 239-248

P04 F. Marini, A.L. Magrì, D. Marini, F. Balestrieri, "Characterization of the lipid fraction of niger seeds (*Guizotia Abyssinica* Cass.) from different regions of Ethiopia and India and chemometric authentication of their geographical origin", *Eur. J. Lipid Sci. Tech.*, **105** (2003), 697-704

P05 F. Marini, J. Zupan, A.L. Magrì, "On the use of counterpropagation artificial neural networks to characterize Italian rice varieties", *Anal. Chim. Acta*, **510** (2004), 231-240

P06 F. Marini, A.L. Magrì, F. Balestrieri, F. Fabretti, D. Marini, "Supervised pattern recognition applied to the discrimination of the floral origin of Italian honey samples", *Anal. Chim. Acta*, **515** (2004), 117-125

P07 F. Marini, F. Balestrieri, R. Bucci, A.L. Magrì, D. Marini, "Supervised pattern recognition to authenticate Italian olive oil varieties", *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, **73** (2004), 85-93

P08 F. Biasioli, F. Gasperi, G. Odorizzi, E. Aprea, D. Mott, G. Autiero, F. Marini, T.D. Märk, "PTR-MS monitoring of odour emissions from composting plants", *Int. J. Mass Spectrom.*, **239** (2004), 103-109

P09 F. Biasioli, F. Gasperi, G. Odorizzi, E. Aprea, D. Mott, F. Marini, G. Autiero, G. Rotondo, T.D. Märk, "Studio sull'applicabilità del PTR-MS al controllo degli odori negli impianti per il trattamento dei rifiuti", *Rifiuti Solidi*, **18** (2004), 220-229

P10 F. Marini, J. Zupan, A.L. Magrì, "Class-modeling using Kohonen artificial neural networks", *Anal. Chim. Acta*, **544** (2005), 306-314

- P11 F. Marini, A.L. Magrì, R. Bucci, F. Balestrieri, D. Marini, “Class-modeling techniques in the authentication of PDO Italian oils from Sicily”, *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, **80** (2005), 140-149
- P12 F. Marini, A. Roncaglioni, M. Novič, “Variable Selection and Interpretation in Structure-Affinity Correlation Modeling of Estrogen Receptor Binders”, *J. Chem. Inf. Model.*, **45** (2005), 1507-1519
- P13 F. Biasioli, F. Gasperi, E. Aprea, I. Endrizzi, V. Framondino, F. Marini, D. Mott, T.D. Märk, “Correlation of PTR-MS spectral fingerprint with sensory characterization of flavour and odour profile of ‘Trentingrana’ cheese”, *Food Qual. Pref.*, **17** (2006), 63-75
- P14 R. Bucci, F. Balestrieri, A.D. Magrì, A.L. Magrì, F. Marini, “UV-Vis spectrophotometric method for the quantitation of all the components of Italian general denaturant and its application to check the conformity of alcohol samples”, *Talanta*, **68** (2006), 781-790
- P15 V. Vinciguerra, R. Bucci, F. Marini, A. Napoli, “Thermal behaviour of iminodiacetic, oxydiacetic and thiodiacetic acids”, *J. Therm. Anal. Calorim.*, **83** (2006), 475-478
- P16 F. Marini, R. Bucci, A.L. Magrì, A.D. Magrì, “Authentication of Italian PDO wines by class-modeling techniques”, *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, **84** (2006), 164-171
- P17 E. Aprea, F. Biasioli, F. Gasperi, D. Mott, F. Marini, T.D. Märk, “Assessment of Trentingrana cheese ageing by proton transfer reaction-mass spectrometry and chemometrics”, *Int. Dairy J.*, **17** (2007), 226-234
- P18 F. Marini, A.L. Magrì, R. Bucci, “Multilayer feed-forward neural networks for class-modeling”, *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, **88** (2007), 118-124
- P19 F. Marini, A.L. Magrì, R. Bucci, A.D. Magrì, “Use of different artificial neural networks to resolve binary blends of monocultivar Italian olive oils”, *Anal. Chim. Acta*, **599** (2007), 232-240
- P20 F. Marini, R. Bucci, A.L. Magrì, A.D. Magrì, R. Acquistucci, R. Francisci, “Classification of 6 Durum Wheat Cultivars from Sicily (Italy) Using Artificial Neural Networks”, *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, **90** (2008), 1-7
- P21 F. Marini, A.L. Magrì, R. Bucci, A.D. Magrì, “Artificial Neural Networks in Chemometrics: History, Examples and Perspectives”, *Microchem. J.*, **88** (2008), 178-85
- P22 L. Campanella, E. Gregori, F. Marini, M. Tomassetti, “Biosensors, colorimetric tests and chemometrics to check antioxidant and prooxidant properties of several animal feeds”, *J. Agric. Food. Environ.*, **6** (2008), 326-332
- P23 M.S. Simonetti, F. Damiani, L. Gabrielli, L. Cossignani, F. Blasi, F. Marini, D. Montesano, A. Maurizi, E. Ventura, A. Bosi, P. Damiani, “Characterization of triacylglycerols in *Arbutus Unedo* L. seeds”, *Italian J. Food Sci.*, **20** (2008), 49-56
- P24 L. Cossignani, F. Damiani, L. Gabrielli, D. Montesano, M.S. Simonetti, T. Petrosino, F. Ventura, F. Marini, P. Damiani, “Structural characteristics of the triacylglycerol fraction from the seed fat of *Mangifera Indica* L.”, *Italian J. Food Sci.*, **20** (2008), 263-271
- P25 F. Marini, R. Bucci, I. Ginevra, A.L. Magrì, “Coupling of IR measurements and multivariate calibration techniques for the determination of enantiomeric excess in pharmaceutical preparations”, *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, **97** (2009), 52-63.
- P26 F. Marini, “Artificial neural networks in food analysis: trends and perspectives. A review”, *Anal. Chim. Acta*, **635** (2009), 121-131.
- P27 M. West-Nørager, R. Bro, F. Marini, E.V. Høgdall, C.K. Høgdall, L. Nedergaard, N.H.H. Heegard, “Feasibility of serodiagnosis of ovarian cancer by mass spectrometry”, *Anal. Chem.*, **81** (2009), 1907-1913.
- P28 A. Miccheli, F. Marini, G. Capuani, A. Tomassini Miccheli, M. Delfini, M.E. Di Cocco, C. Puccetti, M. Paci, M. Rizzo, A. Spataro, “The influence of a sports drink on the postexercise metabolism of elite athletes as investigated by NMR-based metabolomics”, *J. Am. Coll. Nutr.*, **28** (2009), 553-564.
- P29 M. Ritota, F. Marini, P. Sequi, M. Valentini, “Metabolomic characterization of Italian sweet pepper (*Capsicum annum* L.) by means of HRMAS-NMR spectroscopy and multivariate analysis”, *J. Agric. Food Chem.*, **58** (2010), 9675-9684.

- P30 L. Mannina, F. Marini, M. Gobino, A.P. Sobolev, D. Capitani, "NMR and chemometrics in tracing European olive oils: the case study of Ligurian samples", *Talanta*, **80** (2010), 2141-2148.
- P31 F. Marini, "Classification methods in chemometrics", *Curr. Anal. Chem.*, **6** (2010), 72-79.
- P32 C. Cavaliere, P. Foglia, F. Marini, R. Samperi, D. Antonacci, A. Laganà, "The interactive effects of irrigation, nitrogen fertilization rate, delayed harvest and storage on the polyphenol content in red grape (*Vitis Vinifera*) berries: A factorial experimental design", *Food Chem.*, **122** (2010), 1176-1184.
- P33 F. Marini, A. D'Aloise, R. Bucci, F. Buiarelli, A.L. Magrì, A.D. Magrì, "Fast analysis of 4 phenolic acids in olive oil by HPLC-DAD and chemometrics", *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, **106** (2011), 142-149.
- P34 S. Bellato, V. Del Frate, R. Redaelli, D. Sgrulletta, R. Bucci, A.D. Magrì, F. Marini, "Use of Near Infrared Reflectance and Transmittance coupled to Robust Calibration for the evaluation of nutritional value of naked oats", *J. Agric. Food Chem.*, **59** (2011), 4349-4360.
- P35 F. Marini, B. Walczak, "Finding relevant clustering directions in high-dimensional data using Particle Swarm Optimization", *J. Chemometr.*, **25** (2011), 366-374.
- P36 A.A. Gowen, F. Marini, C. Esquerre, C. O'Donnell, G. Downey, J. Burger, "Time series hyperspectral chemical imaging data: Challenges, solutions and applications", *Anal. Chim. Acta*, **705** (2011), 272-282.
- P37 M. Bevilacqua, R. Bucci, A.D. Magrì, A.L. Magrì, F. Marini, "Tracing the origin of extra virgin olive oils by infrared spectroscopy and chemometrics: A case study", *Anal. Chim. Acta*, **717** (2012), 39-51.
- P38 M. Favaro, A. Guastoni, F. Marini, S. Bianchin, A. Gambirasi, "Characterization of lapis lazuli and corresponding purified pigments for a provenance study of ultramarine pigments used in works of art", *Anal. Bioanal. Chem.*, **402** (2012), 2195-2208.
- P39 C. Ruiz-Samblás, F. Marini, L. Cuadros-Rodriguez, A. González-Casado, "Quantification of blending of olive oils and edible vegetable oils by triacylglycerol fingerprint gas chromatography and chemometric tools", *J. Chromatogr. B*, **910** (2012) 71-77.
- P40 F. Marini, M. Tomassetti, S. Vecchio, "Detailed kinetic and chemometric study of the cellulose thermal breakdown in artificially aged and non aged commercial paper. Different methods for computing activation energy as an assessment model in archaeometric applications", *Chem. Centr. J.*, **6 Suppl.2** (2012), S7.
- P41 M. Tomassetti, F. Marini, L. Campanella, A. Coppa, "Study of modern or ancient collagen and human fossil bones from an archaeological site of middle Nile by thermal analysis and chemometrics", *Microchem. J.*, **108** (2013) 7-13.
- P42 R. Vitale, M. Bevilacqua, R. Bucci, A.D. Magrì, A.L. Magrì, F. Marini, "A rapid and non-invasive method for authenticating the origin of pistachio samples by NIR spectroscopy and chemometrics", *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, **121** (2013) 90-99.
- P43 M. Bevilacqua, R. Bucci, S. Materazzi, F. Marini, "Application of near infrared (NIR) spectroscopy coupled to chemometrics for dried egg-pasta characterization and egg content quantification", *Food Chem.*, **140** (2013) 726-734.
- P44 E. Salvatore, M. Cocchi, A. Marchetti, F. Marini, A. de Juan, "Determination of phenolic compounds and authentication of PDO Lambrusco wines by HPLC-DAD and chemometric techniques", *Anal. Chim. Acta*, **761** (2013) 34-45.
- P45 S. Serranti, D. Cesare, F. Marini, G. Bonifazi, "Classification of oat and groat kernels using NIR hyperspectral imaging", *Talanta*, **103** (2013) 276-284.
- P46 D. Rago, M. Kristensen, G. Gürdeniz, F. Marini, M. Poulsen, L.O. Dragsted, "A LCMS metabolomics approach to investigate the effect of raw apple intake in the rat plasma metabolome", *Metabolomics*, **9** (2013), 1202-1215.
- P47 E. Brasili, E. Mengheri, A. Tomassini, G. Capuani, M. Roselli, A. Finamore, F.

- Sciubba, F. Marini, A. Miccheli, "Lactobacillus acidophilus La5 and Bifidobacterium lactis Bb12 Induce Different Age-Related Metabolic Profiles Revealed by 1H-NMR Spectroscopy in Urine and Feces of Mice", *J. Nutr.*, **143** (2013) 1549-1557.
- P48 F. Marini, R. Bro, "SCREAM: A novel method for multi-way regression problems with shifts and shape changes in one mode", *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, **129** (2013) 64-75.
- P49 A.R. Sprocati, C. Alisi, V. Pinto, M.R. Montereali, P. Marconi, F. Tasso, K. Turnau, G. De Giudici, K. Goralska, M. Bevilacqua, F. Marini, C. Cremisini, "Assessment of the applicability of a "tool-box" designed for microbially assisted phytoremediation: the case study at Ingurto mining site (Italy)", *Environ. Sci. Pollut. Res.*, **21** (2014) 6939-6951.
- P50 M. Bevilacqua, R. Nescatelli, R. Bucci, A.L. Magri, A.D. Magri, F. Marini, "Chemometric classification techniques as a tool for solving problems in analytical chemistry", *J. AOAC Int.*, **97** (2014) 19-28.
- P51 R. Calvani, E. Brasili, G. Praticò, G. Capuani, A. Tomassini, F. Marini, F. Sciubba, A. Finamore, M. Roselli, E. Marzetti, A. Miccheli, "Fecal and urinary NMR-based metabolomics unveil an aging signature in mice", *Exp. Gerontol.*, **49** (2014) 5-11.
- P52 C. Mazzuca, L. Micheli, F. Marini, M. Bevilacqua, G. Bocchinfuso, A. Palleschi, "Rheoreversible hydrogels in document restoration processes: a versatile tool", *Chem. Centr. J.*, **8** (2014) 10.
- P53 M. Tomassetti, F. Marini, L. Campanella, A. Coppa, "Archaeometric classification of ancient human fossil bones, with particular attention to their carbonate content, using chemometrics, thermogravimetry and ICP emission", *Chem. Centr. J.*, **8** (2014) 26.
- P54 T. Gatta, E. Gregori, F. Marini, M. Tomassetti, G. Visco, L. Campanella, "New approach to the differentiation of marble samples using thermal analysis and chemometrics in order to identify provenance", *Chem. Centr. J.*, **8** (2014), 35.
- P55a R. Tauler, F. Marini, B. Walczak, L. Buydens, R.G. Brereton, W. Buchberger, P.J. Worsfold, "European Analytical Column Number 42", *J. Anal. Chem.*, **69** (2014) 812-816.
- P55b R. Tauler, F. Marini, B. Walczak, L. Buydens, R.G. Brereton, W. Buchberger, P.J. Worsfold, "European Analytical Column Number 42", *Accr. Qual. Assur.*, **19** (2014) 225-229.
- P55c R. Tauler, F. Marini, B. Walczak, L. Buydens, R.G. Brereton, W. Buchberger, P.J. Worsfold, "European Analytical Column Number 42", *Anal. Bioanal. Chem.*, **406** (2014) 3525-3529.
- P55d R. Tauler, F. Marini, B. Walczak, L. Buydens, R.G. Brereton, W. Buchberger, P.J. Worsfold, "European Analytical Column Number 42", *Trends Anal. Chem.*, **56** (2014) IX-XIII.
- P55e R. Tauler, F. Marini, B. Walczak, L. Buydens, R.G. Brereton, W. Buchberger, P.J. Worsfold, "European Analytical Column Number 42", *J. Serbian Chem. Soc.*, **79** (2014) 509-516.
- P56 L. Rigoni, S. Venti, M. Bevilacqua, R. Bucci, A.D. Magri, A.L. Magri, F. Marini, "Quantification of the enantiomeric excess of two APIs by means of near infrared spectroscopy and chemometrics", *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, **133** (2014) 149-156.
- P57 A. Biancolillo, R. Bucci, A.L. Magri, A.D. Magri, F. Marini, "Data-fusion for multiplatform characterization of an Italian craft beer aimed at its authentication", *Anal. Chim. Acta*, **820** (2014), 23-31.
- P58 M. Bevilacqua, F. Marini, "Local classification: Locally weighted-partial least squares-discriminant analysis (LW-PLS-DA)", *Anal. Chim. Acta*, **838** (2014) 20-30.
- P59 J. Casado, R. Nescatelli, I. Rodriguez, M. Ramil, F. Marini, R. Cela, "Determination of benzotriazoles in water samples by concurrent derivatization-dispersive liquid-liquid microextraction followed by gas chromatography-mass spectrometry", *J. Chromatogr. A*, **1336** (2014) 1-9.
- P60 A.P. Sobolev, S. Carradori, D. Capitani, S. Vista, A. Trella, F. Marini, L. Mannina, "Saffron Samples of Different Origin: An NMR Study of Microwave-Assisted Extracts", *Foods*, **3** (2014) 403-419.
- P61 E. Marzetti, F. Landi, F. Marini, M. Cesari, T.W. Buford, T. M. Manini, G. Onder, M. Pahor, R. Bernabei, C. Leeuwenburgh, R. Calvani, "Patterns of circulating inflammatory biomarkers in older

- persons with varying levels of physical performance: a Partial Least Squares–Discriminant Analysis (PLS–DA) approach”, *Front. Med.*, **1** (2014) 27.
- P62 R. Calvani, E. Brasili, G. Praticò, F. Sciubba, M. Roselli, A. Finamore, F. Marini, E. Marzetti, A. Miccheli, “Application of NMR-based metabolomics to the study of gut microbiota in obesity”, *J. Clin. Gastroenterol.*, **48 Suppl.1** (2014) S5-S7.
- P63 E. Brasili, G. Praticò, F. Marini, A. Valletta, G. Capuani, F. Sciubba, A. Miccheli, G. Pasqua, “A non-targeted metabolomics approach to evaluate the effects of biomass growth and chitosan elicitation on primary and secondary metabolism of *Hypericum perforatum* in vitro roots”, *Metabolomics*, **10** (2014) 1186-1196.
- P64 R. Nescatelli, R.C. Bonanni, R. Bucci, A.L. Magri, A.D. Magri, F. Marini, “Geographical traceability of extra virgin olive oils from Sabina PDO by chromatographic fingerprinting of the phenolic fraction coupled to chemometrics”, *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, **139** (2014) 175-180.
- P65 E. Marzetti, R. Calvani, M. Lorenzi, F. Marini, E. D'Angelo, A. M. Martone, M. Celi, M. Tosato, R. Bernabei, F. Landi, “Serum levels of C-terminal agrin fragment (CAF) are associated with sarcopenia in older hip fractured patients”, *Exp. Gerontol.*, **60** (2014) 79-82.
- P66 A. Tomassini, A. Vitalone, F. Marini, G. Praticò, F. Sciubba, M. Bevilacqua, M. Delfini, A. Di Sotto, S. Di Giacomo, P. Mariani, C.L. Mammola, E. Gaudio, A. Miccheli, G. Mazzanti, “¹H NMR-based urinary metabolic profiling reveals changes in nicotinamide pathway intermediates due to postnatal stress model in rat”, *J. Prot. Res.*, **13** (2014) 5848-5859.
- P67 A.A. Gowen, F. Marini, Y. Tsuchisaka, S. De Luca, M. Bevilacqua, C. O'Donnell, G. Downey, R. Tsenkova, “On the feasibility of near infrared spectroscopy to detect contaminants in water using single salt solutions as model systems”, *Talanta*, **131** (2015) 609-618.
- P68 A. Guelpa, M. Bevilacqua, F. Marini, K. O’Kennedy, P. Geladi, M. Manley, “Application of Rapid Visco Analyser (RVA) viscograms and chemometrics for maize hardness characterisation”, *Food Chem.*, **173** (2015) 1220-1227.
- P69 A. Miccheli, G. Capuani, F. Marini, A. Tomassini, G. Praticò, S. Ceccarelli, D. Gnani, G. Baviera, A. Alisi, L. Putignani, V. Nobili, “Urinary ¹H-NMR-based metabolic profiling of children with NAFLD undergoing VSL#3 treatment”, *Int. J. Obesity*, **39** (2015) 1118-1125.
- P70 M. Tomassetti, F. Marini, L. Campanella, M. Positano, F. Marinucci, “Suitable classification of mortars from ancient Roman and Renaissance frescoes using thermal analysis and chemometrics”, *Chem. Centr. J.*, **9** (2015) 23.
- P71 E. Ghanem, H. Hopfer, A. Navarro, M. Ritzer, L. Mahmood, M. Fredell, A. Cubley, J. Bolen, R. Fattah, K. Teasdale, L. Lieu, T. Chua, F. Marini, H. Heymann, E. Anslyn, “Predicting the composition of red wine blends using an array of multicomponent peptide-based sensors”, *Molecules*, **20** (2015) 9170-9182.
- P72 R. Calvani, F. Marini, M. Cesari, M. Tosato, S.D. Anker, S. von Haehling, R.R. Miller, R. Bernabei, F. Landi, E. Marzetti, “Biomarkers for physical frailty and sarcopenia: state of the science and future developments”, *J. Cachexia Sarcopenia Muscle*, **6** (2015) 278-286.
- P73 F. Marini, D. de Beer, E. Joubert, B. Walczak, “Analysis of variance of designed chromatographic data sets: The Analysis of Variance-Target Projection approach”, *J. Chromatogr. A*, **1405** (2015) 94-102.
- P74 F. Marini, N.B. Gallagher, “Meeting report: ICRM-2014 international chemometrics research meeting”, *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, **146** (2015) 147-148.
- P75 F. Westad, F. Marini, “Validation of chemometric models – A tutorial”, *Anal. Chim. Acta*, **893** (2015) 14-24.
- P76 F. Marini, B. Walczak, “Particle swarm optimization (PSO). A tutorial”, *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, **149** (2015) 153-165.
- P77 M. Tomassetti, F. Marini, R. Bucci, A. Coppa, L. Campanella, “Human fossil bones: archaeometric classification using chemometrics and thermogravimetry. Influence of skeleton fossilization and its anatomical parts”, *Microchem. J.*, **124** (2016) 396-401.

- P78 M. Tomassetti, F. Marini, R. Bucci, L. Campanella “A survey on innovative dating methods in archaeometry with focus on fossil bones”, *Trends Anal. Chem.*, **79** (2016) 371-379.
- P79 E. Brasili, A. Miccheli, F. Marini, G. Praticò, M.E. Di Cocco, F. Sciubba, V. Cechinel-Filho, N. Tocci, A. Valletta, G. Pasqua “Metabolic profile and root development of *Hypericum perforatum* L. in vitro roots under stress conditions due to chitosan treatment and culture time”, *Front. Plant Sci.*, **7** (2016) 507.
- P80 C.E. Eskildsen, P.W. Hansen, T. Skov, F. Marini, L. Nørgaard “Evaluation of multivariate calibration models transferred between spectroscopic instruments: Applied to near infrared measurements of flour samples”, *J. Near Infrared Spectrosc.*, **24** (2016) 151-156.
- P81 L. Mannina, F. Marini, R. Antiochia, S. Cesa, A. Magri, D. Capitani, A.P. Sobolev “Tracing the origin of beer samples by NMR and chemometrics: Trappist beers as a case study”, *Electrophoresis*, **37** (2016) 2710-2719.
- P82 G. Tranfo, E. Pigini, E. Paci, F. Marini, R.C. Bonanni, “Association of exposure to benzene and smoking with oxidative damage to nucleic acids by means of biological monitoring of general population volunteers”, *Environ. Sci. Pollut. Res.*, **24** (2019) 13885-13894.
- P83 R. Calvani, F. Marini, M. Cesari, T.W. Bruford, T.M. Manini, M. Pahor, C. Leeuwenburgh, R. Bernabei, F. Landi, E. Marzetti “Systemic inflammation, body composition, and physical performance in old community-dwellers”, *J. Cachexia Sarcopenia Muscle*, **8** (2017) 69-77.
- P84 S. De Luca, M. De Filippis, R. Bucci, A.D. Magri, A.L. Magri, F. Marini, “Characterization of the effects of different roasting conditions on coffee samples of different geographical origins by HPLC-DAD, NIR and chemometrics”, *Microchem. J.*, **129** (2016) 348-361.
- P85 S. Hugelier, P. Firmani, O. Devos, M. Moreau, C. Pierlot, F. Marini, C. Ruckebusch, “Weighted fuzzy clustering for (fuzzy) constraints in multivariate image analysis– alternating least square of hyperspectral images”, *J. Spectral Imaging*, **5** (2016) a7.
- P86 A. Vignoli, D.M. Rodio, A. Bellizzi, A.P. Sobolev, E. Anzivino, M. Mischitelli, L. Tenori, F. Marini, R. Priori, R. Scrivo, G. Valesini, A. Francia, M. Morreale, M.R. Ciardi, M. Iannetta, C. Campanella, D. Capitani, C. Luchinat, V. Pietropaolo, L. Mannina, “NMR-based metabolomic approach to study urine samples of chronic inflammatory rheumatic disease patients”, *Anal. Bioanal. Chem.*, **409** (2017) 1405-1413.
- P87 A. Guelpa, F. Marini, A. du Plessis, R. Slabbert, M. Manley, “Verification of authenticity and fraud detection in South African honey using NIR spectroscopy”, *Food Contr.* **73** (2017) 1388-1396.
- P88 R. Nescatelli, S. Carradori, F. Marini, V. Caponigro, R. Bucci, C. De Monte, A. Mollica, L. Mannina, M. Ceruso, C.T. Supuran, D. Secci, “Geographical characterization by MAE-HPLC and NIR methodologies and carbonic anhydrase inhibition of Saffron components”, *Food Chem.*, **221** (2017) 855-863.
- P89 F. Marini, D. de Beer, N.A. Walters, A. de Villiers, E. Joubert, B. Walczak, “Multivariate analysis of variance of designed chromatographic data. A case study involving fermentation of rooibos tea”, *J. Chromatogr. A*, **1489** (2017) 115-125.
- P90 R. Calvani, F. Marini, M. Cesari, M. Tosato, A. Picca, S.D. Anker, S. von Haehling, R.R. Miller, R. Bernabei, F. Landi, E. Marzetti. For the SPRINTT Consortium, “Biomarkers for physical frailty and sarcopenia”, *Ageing Clin. Exp. Res.*, **29** (2017) 29-34.
- P91 V. Giannetti, M. Boccacci Mariani, P. Mannino, F. Marini, “Volatile fraction analysis by HS-SPME/GC-MS and chemometric modeling for traceability of apples cultivated in the Northeast Italy”, *Food Contr.*, **78** (2017) 215-221.
- P92 M.L. Spagnuolo, F. Marini, L.A. Sarabia, M.C. Ortiz, “Migration test of Bisphenol A from polycarbonate cups using excitation-emission fluorescence data with parallel factor analysis”, *Talanta*, **167** (2017) 367-378.
- P93 M. Tomassetti, F. Marini, R. Bucci, A. Coppa, L. Campanella, “Comparison of NIR Spectroscopy Coupled to Chemometrics and Derivative Thermogravimetry for Relative Dating of Human Fossil Bones”, *J. Therm. Anal. Calorim.*, **130** (2017) 559-565.

- P94 R.G. Brereton, J. Jansen, J. Lopes, F. Marini, A. Pomerantsev, O. Rodionova, J.M. Roger, B. Walczak, R. Tauler, “Chemometrics in analytical chemistry—part I: history, experimental design and data analysis tools”, *Anal. Bioanal. Chem.*, **409** (2017) 5891-5899.
- P95 M. Bevilacqua, R. Bro, F. Marini, Å. Rinnan, M.A. Rasmussen, T. Skov, “Recent chemometrics advances for Foodomics”, *Trends Anal. Chem.*, **96** (2017) 42-51.
- P96 G. Tranfo, D. Pignini, E. Paci, F. Marini, R.C. Bonanni, “Association of exposure to benzene and smoking with oxidative damage to nucleic acids by means of biological monitoring of general population volunteers”, *Environ. Sci. Pollut. Res.*, **24** (2017) 13885-13894.
- P97 A. Palermo, M. Fosca, G. Tabacco, F. Marini, V. Graziani, M.C. Santarsia, F. Longo, A. Lauria, R. Cesareo, I. Giovannoni, C. Taffon, M. Rocchia, S. Manfrini, P. Crucitti, P. Pozzilli, A. Crescenzi, J.V. Rau, “Raman Spectroscopy Applied to Parathyroid Tissues: A New Diagnostic Tool to Discriminate Normal Tissue from Adenoma”, *Anal. Chem.*, **90** (2018) 847-854.
- P98 V. Moreira, E. Brasili, J. Fiamoncini, F. Marini, A. Miccheli, H. Daniel, J.J. Hye Lee, N.M. Aymoto Hassimotto, F.M. Lajolo, “Orange juice affects acylcarnitine metabolism in healthy volunteers as revealed by a mass-spectrometry based metabolomics approach”, *Food Res. Int.*, **107** (2018) 346-352.
- P99 V. Caponigro, F. Marini, A. Gowen, “Hydration of hydrogels studied by near-infrared hyperspectral imaging”, *J. Chemometr.*, **32** (2018) e2972.
- P100 R. Calvani, A. Picca, M. Cesari, M. Tosato, F. Marini, E. Manes-Gravina, R. Bernabei, F. Landi, E. Marzetti, “Biomarkers for sarcopenia: Reductionism vs. complexity”, *Curr. Protein Pept. Sci.*, **19** (2018) 639-642.
- P101 K.H. Liland, A. Smilde, F. Marini, T. Naes, “Confidence ellipsoids for ASCA models based on multivariate regression theory”, *J. Chemometr.*, **32** (2018) e2990.
- P102 P. Firmani, S. Hugelier, F. Marini, C. Ruckebusch, “MCR-ALS of hyperspectral images with spatio-spectral fuzzy clustering constraint”, *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, **179** (2018) 85-91.
- P103 S. De Luca, E. Ciotoli, A. Biancolillo, R. Bucci, A.D. Magri, F. Marini, “Simultaneous quantification of caffeine and chlorogenic acid in coffee green beans and varietal classification of the samples by HPLC-DAD coupled with chemometrics”, *Environ. Sci. Pollut. Res.*, **25** (2018) 28748-28759.
- P104 F. Tombolini, D. Pignini, G. Tranfo, E. Paci, I. Carosi, F. Marini, L. Bauleo, C. Ancona, F. Forastiere, “Levels of urinary metabolites of four PAHs and cotinine determined in 1016 volunteers living in Central Italy”, *Environ. Sci. Pollut. Res.*, **25** (2018) 28772-28779.
- P105 A. Biancolillo, S. De Luca, S. Bassi, L. Roudier, R. Bucci, A.D. Magri, F. Marini, “Authentication of an Italian PDO hazelnut (“Nocciola Romana”) by NIR spectroscopy”, *Environ. Sci. Pollut. Res.*, **25** (2018) 28780-28786.
- P106 A. Apriceno, R. Bucci, A.M. Girelli, F. Marini, L. Quattrocchi, “5-Hydroxymethyl furfural determination in Italian honeys by a fast near infrared spectroscopy”, *Microchem. J.*, **143** (2018) 140-144.
- P107 R.G. Brereton, J. Jansen, J. Lopes, F. Marini, A. Pomerantsev, O. Rodionova, J.M. Roger, B. Walczak, R. Tauler, “Chemometrics in analytical chemistry—part II: modeling, validation, and applications”, *Anal. Bioanal. Chem.*, **410** (2018) 6691-6704.
- P108 R. Vitale, F. Marini, C. Ruckebusch, “SIMCA modeling for overlapping classes: fixed or optimized decision threshold?”, *Anal. Chem.*, **90** (2018) 10738-10747.
- P109 E. Amante, E. Alladio, A. Salomone, M. Vincenti, F. Marini, G. Alleva, S. De Luca, F. Porpiglia, “Correlation between chronological and physiological age of males from their multivariate urinary endogenous steroid profile and prostatic carcinoma-induced deviation”, *Steroids*, **139** (2018) 10-17.
- P110 R. Calvani, A. Picca, F. Marini, A. Biancolillo, M. Cesari, V. Pesce, A.M. Serena Lezza, M. Bossola, C. Leeuwenburgh, R. Bernabei, F. Landi, E. Marzetti, “The “BIOMarkers associated with Sarcopenia and PHysical frailty in EldeRly pERsons” (BIOSPHERE) study: Rationale, design and methods”, *Eur. J. Intern. Med.*, **56** (2018) 19-25.

- P111 R. Calvani, A. Picca, F. Marini, A. Biancolillo, J. Gervasoni, S. Persichilli, A. Primiano, H.J. Coelho-Junior, M. Bossola, A. Urbani, F. Landi, R. Bernabei, E. Marzetti, “A Distinct Pattern of Circulating Amino Acids Characterizes Older Persons with Physical Frailty and Sarcopenia: Results from the BIOSPHERE Study”, *Nutrients*, **10** (2018) 1691.
- P112 P. Vernocchi, F. Del Chierico, A. Russo, F. Majo, M. Rossitto, M. Valerio, L. Casadei, A.L. Storia, F. De Filippis, C. Rizzo, C. Manetti, P. Paci, D. Ercolini, F. Marini, E. Fiscarelli, B. Dallapiccola, V. Lucidi, A. Miccheli, L. Putignani, “Gut microbiota signatures in cystic fibrosis: Loss of host CFTR function drives the microbiota enterophenotype”, *PLoS ONE*, **13** (2018) e0208171.
- P113 S. Ghanavati Nasab, A. Semnani, F. Marini, A. Biancolillo, “Prediction of viscosity index and pour point in ester lubricants using quantitative structure-property relationship (QSPR)”, *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, **183** (2018) 59-78.
- P114 A. Biancolillo, F. Marini, “Chemometric Methods for Spectroscopy-Based Pharmaceutical Analysis”, *Front. Chem.*, **6** (2018) 576.
- P115 F. Marini, M. Tomassetti, M. Piacentini, L. Campanella, P. Flamini, “Application of near infrared spectroscopy (NIR), X-ray fluorescence (XRF) and chemometrics to the differentiation of marmora samples from the Mediterranean basin”, *Nat. Prod. Res.*, **33** (2019) 1006-1014.
- P116 D. Zappi, S. Gabriele, L. Gontrani, D. Dini, C. Sadun, F. Marini, M.L. Antonelli, “Biologically friendly room temperature ionic liquids and nanomaterials for the development of innovative enzymatic biosensors: Part II”, *Talanta*, **194** (2019) 26-31.
- P117 J.V. Rau, F. Marini, M. Fosca, C. Cippitelli, M. Rocchia, A. Di Napoli, “Raman spectroscopy discriminates malignant follicular lymphoma from benign follicular hyperplasia and from tumour metastasis”, *Talanta*, **194** (2019) 763-770.
- P118 A. Biancolillo, P. Firmani, R. Bucci, A.D. Magrì, F. Marini, “Determination of insect infestation on stored rice by near infrared (NIR) spectroscopy”, *Microchem. J.*, **145** (2019) 252-258.
- P119 V. Caponigro, F. Marini, R.M. Dorrepaal, A. Herrero-Langreo, A.G.M. Scannell, A.A. Gowen, “Raman and Fourier transform infrared hyperspectral imaging to study dairy residues on different surface”, *J. Spectral Imaging*, **8** (2019) a3.
- P120 A. Biancolillo, M. Tomassetti, R. Bucci, S. Izzo, F. Candilio, F. Marini, “Ancient human bones studied and compared by near infrared spectroscopy, thermogravimetry and chemometrics”, *J. Near Infrared Spec.*, **27** (2019) 6-14.
- P121 E. Brasili, N.M.A. Hassimotto, F. Del Chierico, F. Marini, A. Quagliariello, F. Sciubba, A. Miccheli, L. Putignani, F. Lajolo, “Daily Consumption of Orange Juice from Citrus sinensis L. Osbeck cv. Cara Cara and cv. Bahia Differently Affects Gut Microbiota Profiling as Unveiled by an Integrated Meta-Omics Approach”, *J. Agric. Food Chem.*, **67** (2019) 1381-1391.
- P122 P. Firmani, S. De Luca, R. Bucci, F. Marini, A. Biancolillo, “Near infrared (NIR) spectroscopy-based classification for the authentication of Darjeeling black tea”, *Food Contr.*, **100** (2019) 292-299.
- P123 C. Ingallina, A. Cerreto, L. Mannina, S. Circi, S. Vista, D. Capitani, M. Spano, A.P. Sobolev, F. Marini, “Extra-Virgin Olive Oils from Nine Italian Regions: An ¹H NMR-Chemometric Characterization”, *Metabolites*, **9** (2019) 65.
- P124 L. Strani, S. Grassi, E. Casiraghi, C. Alamprese, F. Marini, “Milk Renneting: Study of Process Factor Influences by FT-NIR Spectroscopy and Chemometrics”, *Food Bioproc. Technol.*, **12** (2019) 954-963.
- P125 A. Picca, R. Calvani, G. Landi, F. Marini, A. Biancolillo, J. Gervasoni, S. Persichilli, A. Primiano, A. Urbani, M. Bossola, A.R. Bentivoglio, M. Cesari, F. Landi, R. Bernabei, E. Marzetti, M.R. Lo Monaco, “Circulating amino acid signature in older people with Parkinson's disease: A metabolic complement to the EXosomes in PARKinson Disease (EXPAND) study”, *Exp. Gerontol.*, **128** (2019) 110766.
- P126 M. Casale, C. Malegori, F. Marini, “VIII Italian Symposium on Near Infrared Spectroscopy – NIRItalia 2018”, *J. Near Infrared Spectrosc.*, **27** (2019) 3-5.
- P127 H. Vu Dang, F. Marini, “Editorial: Chemometrics-based Spectroscopy for Pharmaceutical and Biomedical Analysis”, *Front. Chem.*, **7** (2019) 153.

- P128 E.K. Kemsley, M. Defernez, F. Marini, “Multivariate statistics: Considerations and confidences in food authenticity problems”, *Food Contr.*, **105** (2019) 102-112.
- P129 V. Giannetti, M. Boccacci Mariani, F. Marini, P. Torrelli, A. Biancolillo, “Flavour fingerprint for the differentiation of Grappa from other Italian distillates by GC-MS and chemometrics”, *Food Contr.*, **105** (2019) 123-130.
- P130 V. Giannetti, M. Boccacci Mariani, P. Torrelli, F. Marini, “Flavour component analysis by HS-SPME/GC-MS and chemometric modeling to characterize Pilsner-style Lager craft beers”, *Microchem. J.*, **149** (2019) 103991.
- P131 P. Firmani, R. Bucci, F. Marini, A. Biancolillo, “Authentication of “Avola almonds” by near infrared (NIR) spectroscopy and chemometrics”, *J. Food Compos. Anal.*, **82** (2019) 103235.
- P132 E. Marzetti, A. Picca, F. Marini, A. Biancolillo, H.J. Coelho-Junior, J. Gervasoni, M. Bossola, M. Cesari, G. Onder, F. Landi, R. Bernabei, R. Calvani, “Inflammatory signatures in older persons with physical frailty and sarcopenia: The frailty “cytokinome” at its core”, *Exp. Gerontol.*, **122** (2019) 129-138.
- P133 A. Quaranta, I. Karlsson, L. Ndreu, F. Marini, M. Ingelsson, G. Thorsén, Glycosylation profiling of selected proteins in cerebrospinal fluid from Alzheimer's disease and healthy subjects”, *Anal. Meth.*, **11** (2019) 3331-3340.
- P134 B.T. Herrera, S.R. Moor, M. McVeigh, E.K. Roesner, F. Marini, E.V. Anslyn, “Rapid Optical Determination of Enantiomeric Excess, Diastereomeric Excess, and Total Concentration Using Dynamic-Covalent Assemblies: A Demonstration Using 2-Aminocyclohexanol and Chemometrics”, *J. Am. Chem. Soc.*, **141** (2019) 11151-11160.
- P135 A. Picca, H. Coelho-Junior, M. Cesari, F. Marini, A. Miccheli, J. Gervasoni, M. Bossola, F. Landi, R. Bernabei, E. Marzetti, R. Calvani, “The metabolomics side of frailty: Towards personalized medicine for the aged”, *Exp. Gerontol.* **126** (2019) 110692.
- P136 J.-M. Roger, A. Biancolillo, F. Marini, “Sequential preprocessing through ORThogonalization (SPORT) and its application to near infrared spectroscopy”, *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, **199** (2020) 103975.
- P137 A. Biancolillo, M.A. Maggi, A. De Martino, F. Marini, F. Ruggieri, A.A. D’Archivio, “Authentication of PDO saffron of L’Aquila (*Crocus sativus* L.) by HPLC-DAD coupled with a discriminant multi-way approach”, *Food Contr.*, **110** (2020) 107022.
- P138 P. Firmani, A. Nardecchia, F. Nocente, L. Gazza, F. Marini, A. Biancolillo, “Multi-block classification of Italian semolina based on Near Infrared Spectroscopy (NIR) analysis and alveographic indices”, *Food Chem.*, **309** (2020) 125677.
- P139 M. Ryckewaert, N. Gorretta, F. Henriot, F. Marini, J.-M. Roger, “Reduction of repeatability error for analysis of variance-Simultaneous Component Analysis (REP-ASCA): Application to NIR spectroscopy on coffee sample”, *Anal. Chim. Acta*, **1101** (2020) 23-31.
- P140 A. Biancolillo, M.A. Maggi, S. Bassi, F. Marini, A.A. D’Archivio, “Retention modelling of phenoxy acid herbicides in reversed-phase HPLC under gradient elution”, *Molecules*, **25** (2020) 1262.
- P141 A. Biancolillo, F. Marini, A.A. D’Archivio, “Geographical discrimination of red garlic (*Allium sativum* L.) using fast and non-invasive Attenuated Total Reflectance-Fourier Transformed Infrared (ATR-FTIR) spectroscopy combined with chemometrics”, *J. Food Compos. Anal.*, **86** (2020) 103351.
- P142 S. Schiavone, B. Marchionni, R. Bucci, F. Marini, A. Biancolillo, “Authentication of Grappa (Italian grape marc spirit) by Mid and Near Infrared spectroscopies coupled with chemometrics”, *Vibr. Spectrosc.*, **107** (2020) 103040.
- P143 A. Botticelli, P. Vernocchi, F. Marini, A. Quagliariello, B. Cerbelli, S. Reddel, F. Del Chierico, F. Di Pietro, R. Giusti, A. Tomassini, O. Giampaoli, A. Miccheli, I.G. Zizzari, M. Nuti, L. Putignani, P. Marchetti, “Gut metabolomics profiling of non-small cell lung cancer (NSCLC) patients under immunotherapy treatment”, *J. Translat. Med.*, **18** (2020) 49.
- P144 A. Biancolillo, F. Marini, J.-M. Roger, “SO-CovSel: A novel method for variable selection in a multiblock framework”, *J. Chemometr.*, **34** (2020) e3120.

- P145 G. Rabatel, F. Marini, B. Walczak, J.-M. Roger, “VSN: Variable sorting for normalization”, *J. Chemometr.* **34** (2020) e3164.
- P146 F. Marini, “Orthogonal PLS (O-PLS) and related algorithms”, *J. Chemometr.* **34** (2020) e3214.
- P147 P. Firmani, G. La Piscopia, R. Bucci, F. Marini, A. Biancolillo, “Authentication of P.G.I. Gragnano pasta by near infrared (NIR) spectroscopy and chemometrics”, *Microchem. J.*, **152** (2020) 104339.
- P148 A. Picca, F.R. Ponziani, R. Calvani, F. Marini, A. Biancolillo, H.J. Coelho-Junior, J. Gervasoni, A. Primiano, L. Putignani, F. Del Chierico, S. Reddel, A. Gasbarrini, F. Landi, R. Bernabei, E. Marzetti, “Gut microbial, inflammatory and metabolic signatures in older people with physical frailty and sarcopenia: Results from the BIOSPHERE study”, *Nutrients*, **12** (2020) 65.
- P149 R. Calvani, L. Rodriguez-Mañas, A. Picca, F. Marini, A. Biancolillo, O. Laosa, L. Pedraza, J. Gervasoni, A. Primiano, G. Conta, L. Bourdel-Marchasson, S.C. Regueme, R. Bernabei, E. Marzetti, A.J. Sinclair, G. Gambassi, “Identification of a circulating amino acid signature in frail older persons with type 2 diabetes mellitus: Results from the metabofrail study”, *Nutrients*, **12** (2020) 199.
- P150 R. Calvani, L. Rodriguez-Mañas, A. Picca, F. Marini, A. Biancolillo, O. Laosa, L. Pedraza, J. Gervasoni, A. Primiano, A. Miccheli, L. Bourdel-Marchasson, S.C. Regueme, R. Bernabei, E. Marzetti, A.J. Sinclair, G. Gambassi, European MID-Frail Consortium, “The “Metabolic biomarkers of frailty in older people with type 2 diabetes mellitus” (MetaboFrail) study: Rationale, design and methods”, *Exp. Gerontol.*, **129** (2020) 110782.
- P151 A. Picca, D. Ronconi, H.J. Coelho-Junior, R. Calvani, F. Marini, A. Biancolillo, J. Gervasoni, A. Primiano, C. Pais, E. Meloni, D. Fusco, M.R. Lo Monaco, R. Bernabei, M.C. Cipriani, E. Marzetti, “The “development of metabolic and functional markers of dementia in older people” (ODINO) study: Rationale, design and methods”, *J. Pers. Med.*, **10** (2020) 22.
- P152 A. Picca, F. Guerra, R. Calvani, F. Marini, A. Biancolillo, G. Landi, R. Beli, F. Landi, R. Bernabei, A.R. Bentivoglio, M.R. Lo Monaco, C. Bucci, E. Marzetti, “Mitochondrial Signatures in Circulating Extracellular Vesicles of Older Adults with Parkinson’s Disease: Results from the EXosomes in PARKINSON’S Disease (EXPAND) Study”, *J. Clin. Med.* **9** (2020) 504.
- P153 R. Calvani, A. Picca, F. Marini, A. Biancolillo, J. Gervasoni, S. Persichilli, A. Primiano, H.J. Coelho-Junior, M. Cesari, M. Bossola, A. Urbani, G. Onder, F. Landi, R. Bernabei, E. Marzetti, “Identification of biomarkers for physical frailty and sarcopenia through a new multi-marker approach: results from the BIOSPHERE study”, *GeroScience*, *in press* <https://doi.org/10.1007/s11357-020-00197-x>.
- P154 R. Calvani, A. Picca, G. Landi, F. Marini, A. Biancolillo, H.J. Coelho-Junior, J. Gervasoni, S. Persichilli, A. Primiano, A. Arcidiacono, A. Urbani, M. Bossola, A.R. Bentivoglio, M. Cesari, R. Bernabei, M.R. Lo Monaco, E. Marzetti, “A novel multi-marker discovery approach identifies new serum biomarkers for Parkinson’s disease in older people: an EXosomes in PARKINSON Disease (EXPAND) ancillary study”, *GeroScience*, **42** (2020) 1323-1334.
- P155 V. Giannetti, M. Boccacci Mariani, F. Marini, P. Torrelli, A. Biancolillo, “Grappa and Italian spirits: multi-platform investigation based on GC-MS, MIR and NIR spectroscopies for the authentication of the Geographical Indication”, *Microchem. J.*, **157** (2020) 104896.
- P156 S. Ghanavati Nasab, M. Javaheran Yazd, F. Marini, R. Nescatelli, A. Biancolillo, “Classification of honey applying high performance liquid chromatography, near-infrared spectroscopy and chemometrics”, *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, **202** (2020) 104037.
- P157 P. Mishra, J.M. Roger, D.N. Rutledge, A. Biancolillo, F. Marini, A. Nordon, D. Jouan-Rimbaud-Bouveresse, “MBA-GUI: A chemometric graphical user interface for multi-block data visualisation, regression, classification, variable selection and automated pre-processing”, *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, **205** (2020) 104139.
- P158 F. Babellahi, M.L. Amodio, F. Marini, M.M.A. Chaudhry, M.L.V. de Chiara, L. Mastrandrea, G. Colelli, “Using chemometrics to characterise and unravel the near infra-red spectral changes induced in aubergine fruit by chilling injury as influenced by storage time and temperature”, *Biosyst. Eng.*, **198** (2020) 137-146.

- P159 A. Nardecchia, R. Presutto, R. Bucci, F. Marini, A. Biancolillo, “Authentication of the Geographical Origin of “Vallerano” Chestnut by Near Infrared Spectroscopy Coupled with Chemometrics”, *Food Anal. Meth.*, **13** (2020) 1782-1790.
- P160 P. Firmani, R. Vitale, C. Ruckebusch, F. Marini, “ANOVA-Simultaneous Component analysis modelling of low-level-fused spectroscopic data: A food chemistry case-study”, *Anal. Chim. Acta*, **1125** (2020) 308-314.
- P161 A. Hassoun, M. Gudjónsdóttir, M.A. Prieto, P. Garcia-Oliveira, J. Simal-Gandara, F. Marini, F. Di Donato, A.A. D'Archivio, A. Biancolillo, “Application of novel techniques for monitoring quality changes in meat and fish products during traditional processing processes: Reconciling novelty and tradition”, *Processes*, **8** (2020) 988.
- P162 M. Tomassetti, F. Marini, R. Angeloni, M. Castrucci, L. Campanella, C. Di Natale, “Direct catalytic fuel cell device coupled to chemometric methods to detect organic compounds of pharmaceutical and biomedical interest”, *Sensors*, **20** (2020) 3615.
- P163 A. Biancolillo, A. Santoro, P. Firmani, F. Marini, “Identification and quantification of turmeric adulteration in egg-pasta by near infrared spectroscopy and chemometrics”, *Appl. Sci.*, **10** (2020) 2647.
- P164 L. Amendola, P. Firmani, R. Bucci, F. Marini, A. Biancolillo, “Authentication of Sorrento walnuts by NIR spectroscopy coupled with different chemometric classification strategies”, *Appl. Sci.*, **10** (2020) 4003.
- P165 A. Biancolillo, M. Tomassetti, R. Bucci, F. Marini, L. Campanella, “Chemometrics and thermal analytical investigation of ancient human bones through the estimation of activation energy values of main degradation processes”, *Curr. Anal. Chem.*, **16** (2020) 580-592.
- P166 A. Primiano, S. Persichilli, P.M. Ferraro, R. Calvani, A. Biancolillo, F. Marini, A. Picca, E. Marzetti, A. Urbani, J. Gervasoni, “A Specific Urinary Amino Acid Profile Characterizes People with Kidney Stones”, *Dis. Markers*, **2020** (2020) 8848225.
- P127 E. Marzetti, F. Guerra, R. Calvani, F. Marini, A. Biancolillo, J. Gervasoni, A. Primiano, H.J. Coelho Júnior, F. Landi, R. Bernabei, C. Bucci, A. Picca, “Circulating Mitochondrial-Derived Vesicles, Inflammatory Biomarkers and Amino Acids in Older Adults with Physical Frailty and Sarcopenia: A Preliminary BIOSPHERE Multi-Marker Study using Sequential and Orthogonalized Covariance Selection – Linear Discriminant analysis”, *Front. Cell Dev. Biol.*, **8** (2020) 564417.
- P168 A. Biancolillo, R. Vitale, F. Marini, C. Ruckebusch, “Chemometric Strategies for Spectroscopy-Based Food Authentication”, *Appl. Sci.*, **10** (2020) 6544.
- P169 P. Vernocchi, F. Marini, G. Capuani, A. Tomassini, G. Conta, F. Del Chierico, C. Malattia, F. De Benedetti, A. Martini, B. Dallapiccola, E.H.P. van Dijkhuizen, A. Miccheli, L. Putignani, “Fused Omics Data Models Reveal Gut Microbiome Signatures Specific of Inactive Stage of Juvenile Idiopathic Arthritis in Pediatric Patients”, *Microorganisms*, **8** (2020) 1540.
- P170 P. Mishra, A. Biancolillo, J.-M. Roger, F. Marini, D.N. Rutledge, “New data preprocessing trends based on ensemble of multiple preprocessing techniques”, *Trends Anal. Chem.*, **132** (2020) 116045.
- P171 S. Malek, F. Marini, M.C. Rochat, R. Béraud, G.M. Wright, C.B. Riley, “Infrared spectroscopy of synovial fluid as a potential screening approach for the diagnosis of naturally occurring canine osteoarthritis associated with cranial cruciate ligament rupture”, *Osteoarthr. Cartil. Open*, **2** (2020) 100120.
- P172 P. Mishra, F. Marini, A. Biancolillo, J.-M. Roger, “Improved prediction of fuel properties with near-infrared spectroscopy using a complementary sequential fusion of scatter correction techniques”, *Talanta*, **223** (2021) 121693.
- P173 P. Mishra, F. Marini, B. Brouwera, J.-M. Roger, A. Biancolillo, E. Woltering, E. Hogeveen-van Echtelt, “Sequential fusion of information from two portable spectrometers for improved prediction of moisture and soluble solids content in pear fruit”, *Talanta*, **223** (2021) 121733.

- P174 N. Radosavljević Stevanović, M. Jovanović, F. Marini, S. Ražić, “Chemometric Approach to a Rapid Attenuated Total Reflection Fourier Transform Infrared Red Analysis of Complex Heroin Based Mixtures”, *Appl. Spectrosc.*, *in press.* (doi: 10.1177/0003702820969715).
- P175 P. Mishra, J.-M. Roger, F. Marini, A. Biancolillo, D.N. Rutledge, “Parallel pre-processing through orthogonalization (PORTO) and its application to near-infrared spectroscopy”, *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, *in press.* (doi: 10.1016/j.chemolab.2020.104190).
- P176 S. De Luca, E. Amante, C. Fiori, G. Alleva, E. Alladio, F. Marini, D. Garrou, M. Manfredi, D. Amparore, E. Checcucci, S. Pruner, A. Salomone, R.M. Scarpa, M. Vincenti, F. Porpiglia, “Prospective evaluation of urinary steroids and prostate carcinoma-induced deviation: preliminary results”, *Minerva Urol. Nefrol.*, *accepted.*
- P177 A. Rust, F. Marini, M. Allsopp, P.J. Williams, M. Manley, “Application of ANOVA-simultaneous component analysis to quantify and characterise effects of age, temperature, syrup adulteration and irradiation on near-infrared (NIR) spectral data of honey”, *Spectroch. Acta A*, **253** (2021) 119546.
- P178 V. Giannetti, M. Boccacci Mariani, F. Marini, A. Biancolillo, “Effects of thermal treatments on durum wheat pasta flavour during production process: A modelling approach to provide added-value to pasta dried at low temperatures”, *Talanta*, **225** (2021) 121955.
- P179 P. Leogrande, F. Botrè, X.D.L. Torre, D. Jardines, M.K. Parr, F. Marini, “Coupling high-resolution mass spectrometry and chemometrics for the structural characterization of anabolic-androgenic steroids and the early detection of unknown designer structures”, *Talanta*, **227** (2021) 122173.
- P180 P. Mishra, J.-M. Roger, F. Marini, A. Biancolillo, D.N. Rutledge, “FRUITNIR-GUI: A graphical user interface for correcting external influences in multi-batch near infrared experiments related to fruit quality prediction”, *Postharvest Biol. Technol.*, **175** (2021) 111414.
- P181 A. Cerrato, C. Citti, G. Cannazza, A.L. Capriotti, C. Cavaliere, G. Grassi, F. Marini, C.M. Montone, R. Paris, S. Piovesana, A. Laganà, “Phytocannabinomics: Untargeted metabolomics as a tool for cannabis chemovar differentiation”, *Talanta*, **230** (2021) 122313.
- P182 P. Mishra, J.-M. Roger, D. Jouan-Rimbaud-Bouveresse, A. Biancolillo, F. Marini, A. Nordon, D.N. Rutledge, “Recent trends in multi-block data analysis in chemometrics for multi-source data integration”, *Trends Anal. Chem.*, **137** (2021) 116206.
- P183 K. Sendin, M. Manley, F. Marini, P.J. Williams, “Hierarchical classification pathway for white maize, defect and foreign material classification using spectral imaging”, *Microchem. J.*, **162** (2021) 105824.
- P184 C. Lanzillotta, A. Tramutola, G. Di Giacomo, F. Marini, D.A. Butterfield, F. Di Domenico, M. Perluigi, E. Barone, “Insulin resistance, oxidative stress and mitochondrial defects in Ts65dn mice brain: A harmful synergistic path in down syndrome”, *Free Radic. Biol. Med.*, **165** (2021) 152-170.
- P185 D. Le Nguyen Doan, Q.C. Nguyen, F. Marini, A. Biancolillo, “Authentication of rice (*Oryza sativa* L.) using near infrared spectroscopy combined with different chemometric classification strategies”, *Appl. Sci.*, **11** (2021) 362.
- P186 A. Biancolillo, F. Di Donato, F. Merola, F. Marini, A.A. D’Archivio, “Sequential data fusion techniques for the authentication of the P.G.I. senise (“crusco”) bell pepper”, *Appl. Sci.*, **11** (2021) 1709.

XVb – Capitoli di libri

- B01 F. Marini, “Non-linear modeling: neural networks”. In: B. Walczak, R. Taulèr, S.D. Brown (eds.), *Comprehensive Chemometrics*, vol. 3, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2009, pp.477-505.
- B02 F. Marini, R. Bucci, A.D. Magri, A.L. Magri, “Multivariate analysis of NMR data”. In: E. Brosio (ed.), *Basic NMR in food characterization*, Research Signpost, Kerala, India, 2009, pp.79-92.

- B03 F. Marini, R. Bucci, A.L. Magri, A.D. Magri, “An overview of the chemometric methods for the authentication of the geographical and varietal origin of olive oils”. In: V.R. Preedy, R.R. Watson (eds.), *Olive and olive oil in health and disease prevention*, Academic Press, Oxford, UK, 2010, pp.569-579.
- B04 D. Marini, F. Marini, “Neutral Lipids”, In: L.M.L. Nollet, F. Toldra (eds.), *Food analysis by HPLC*, 3rd ed., CRC Press, Boca Raton, FL, 2013, pp. 139-218.
- B05 F. Marini, “Introduction”. In: F. Marini (ed.), *Chemometrics in Food Chemistry*, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2013, pp. 1-5.
- B06 F. Westad, M. Bevilacqua, F. Marini, “Regression”. In: F. Marini (ed.), *Chemometrics in Food Chemistry*, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2013, pp. 127-170.
- B07 M. Bevilacqua, R. Bucci, A.D. Magri, A.L. Magri, R. Nescatelli, F. Marini, “Classification and Class-Modelling”. In: F. Marini (ed.), *Chemometrics in Food Chemistry*, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2013, pp. 171-233.
- B08 J.M. Amigo, F. Marini, “Multiway Methods”. In: F. Marini (ed.), *Chemometrics in Food Chemistry*, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2013, pp. 265-313.
- B09 E. Salvatore, M. Bevilacqua, R. Bro, F. Marini, M. Cocchi, “Classification methods for multiway arrays as a basic tool for food PDO authentication”. In: M. de la Guardia, A. Gonzalves (eds.), *Food Protected Designation of Origin. Methodologies and applications*, Elsevier, Oxford, UK, 2013, pp. 339-382.
- B10 M. Bevilacqua, F. Biasioli, F. Gasperi, F. Marini, “Advances in analysis of instrumental food sensory quality data”. In: D. Kilcast (ed.), *Instrumental assessment of food sensory quality: A practical guide*, Woodhead Publishing, Cambridge, UK, 2013, pp. 313-351.
- B11 A. Raffo, A. D’Aloise, E. Lardschneider, F. Paoletti, F. Marini, R. Bucci, M. Kelderer, “Effect of soil nutrition on aroma compound formation in organically grown apples (cv. Golden delicious)”. In: V. Ferreira, A. Lopes (eds.), *Flavour science*, Elsevier, Oxford, 2014, pp. 173-176.
- B12 F. Marini, “Chemometrics”. In: B. Caballero, P. Finglas, F. Toldrá (eds.), *Encyclopedia of food and health*, Elsevier, Oxford, UK, Academic Press, Oxford, UK, 2016, vol. 2, pp. 1-9.
- B13 F. Marini, “Triacylglycerols. Characterization and determination”. In: B. Caballero, P. Finglas, F. Toldrá (eds.), *The Encyclopedia of Food and Health*, Academic Press, Oxford, UK, 2016, vol. 5, pp. 345-350.
- B14 A. Biancolillo, F. Marini, “Discriminant analysis and classification of chromatographic data”. In: L. Komsta, Y. Vander Heyden, J. Sherma (eds.), *Chemometrics in Chromatography*, CRC Press, Boca Raton, FL, 2017, pp. 267-284.
- B15 L. Mannina, A.P. Sobolev, V. Aru, A. Bellomaria, F. Bertocchi, B. Botta, L.R. Cagliani, A. Caligiani, F. Capozzi, D. Çela, F.C. Marincola, A. Ciampa, L. Del Coco, R. Consonni, C. Corsaro, M. Delfini, V. Di Tullio, F.P. Fanizzi, V. Gallo, F. Ghirga, R. Gianferri, C.R. Girelli, C. Ingallina, L. Laghi, M. Latronico, F. Longobardi, C. Luchinat, D. Mallamace, S. Mammi, W. Mandaliti, F. Marini, P. Mastroilli, P. Mazzei, A. Miccheli, A. Micozzi, S. Milone, A. Mucci, R. Nepravishta, M. Paci, A. Palisi, A. Piccolo, G. Picone, N. Proietti, A. Randazzo, V. Righi, A. Rotondo, A. Salvo, F. Savorani, P. Scano, F. Sciubba, A. Trimigno, L. Tenori, E. Schievano, P. Turano, S. Vasi, D. Capitani, “NMR methodologies in food analysis”. In: M. Locatelli, C. Celia (Eds), *Analytical chemistry: Developments, applications and challenges in food analysis*, Nova Science Publishers Inc., Hauppauge, NY, 2017, pp. 103-156.
- B16 A.P. Sobolev, L. Mannina, V. Aru, A. Bellomaria, F. Bertocchi, B. Botta, L.R. Cagliani, A. Caligiani, F. Capozzi, D. Çela, F.C. Marincola, A. Ciampa, L. Del Coco, R. Consonni, C. Corsaro, M. Delfini, V. Di Tullio, F.P. Fanizzi, V. Gallo, F. Ghirga, R. Gianferri, C.R. Girelli, C. Ingallina, L. Laghi, M. Latronico, F. Longobardi, C. Luchinat, D. Mallamace, S. Mammi, W. Mandaliti, F. Marini, P. Mastroilli, P. Mazzei, A. Miccheli, A. Micozzi, S. Milone, A. Mucci, R. Nepravishta, M. Paci, A. Palisi, A. Piccolo, G. Picone, N. Proietti, A. Randazzo, V. Righi, A. Rotondo, A. Salvo, F. Savorani, P. Scano, E. Schievano, F. Sciubba, A. Trimigno, L. Tenori, P. Turano, S. Vasi, D. Capitani, “NMR applications in food analysis: Part A”. In: M. Locatelli, C. Celia (Eds), *Analytical chemistry:*

Developments, applications and challenges in food analysis, Nova Science Publishers Inc., Hauppauge, NY, 2017, pp. 157-253.

B17 N. Proietti, D. Capitani, V. Aru, A. Bellomaria, F. Bertocchi, B. Botta, L.R. Cagliani, A. Caligiani, F. Capozzi, D. Çela, F.C. Marincola, A. Ciampa, L. Del Coco, R. Consonni, C. Corsaro, M. Delfini, V. Di Tullio, F.P. Fanizzi, V. Gallo, F. Ghirga, R. Gianferri, C.R. Girelli, C. Ingallina, L. Laghi, M. Latronico, F. Longobardi, C. Luchinat, D. Mallamace, S. Mammi, W. Mandaliti, L. Mannina, F. Marini, P. Mastrorilli, P. Mazzei, A. Miccheli, A. Micozzi, S. Milone, A. Mucci, R. Nepravishita, M. Paci, A. Palisi, A.P. Sobolev, A. Piccolo, G. Picone, N. Proietti, A. Randazzo, V. Righi, A. Rotondo, A. Salvo, F. Savorani, P. Scano, E. Schievano, F. Sciubba, A. Trimigno, L. Tenori, P. Turano, S. Vasi, “NMR applications in food analysis: Part B”. In: M. Locatelli, C. Celia (Eds), Analytical chemistry: Developments, applications and challenges in food analysis, Nova Science Publishers Inc., Hauppauge, NY, 2017, pp. 255-296.

B18 A. Biancolillo, F. Marini, “Chemometrics applied to plant spectral analysis”. In: J. Lopes, C. Sousa (Eds.), Vibrational Spectroscopy for Plant Varieties and Cultivars Characterization (Comprehensive analytical chemistry, vol. 80), Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2018, pp. 69-104.

B20 M. Cocchi, A. Biancolillo, F. Marini, “Chemometric methods for classification and feature selection”. In: J. Jaumot, C. Bedia, R. Tauler (Eds.), Data analysis for omic sciences: methods and applications (Comprehensive analytical chemistry, vol. 82), Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2018, pp. 265-299.

B21 A. Biancolillo, R. Boqué, M. Cocchi, F. Marini, “Data Fusion strategies in food analysis”. In: M. Cocchi (Ed.), Data fusion methodology and applications (Data Handling in Science and Technology, vol. 31), Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2019, pp. 271-310.

B22 F. Marini, J.M. Amigo “Unsupervised exploration of hyperspectral and multispectral images”. In: J.M. Amigo (Ed.), Hyperspectral imaging (Data Handling in Science and Technology, vol. 32), Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2019, pp. 93-114.

B23 A. Biancolillo, F. Marini, “Appendix: Chemometric processing of spectroscopic data”. In: A.A. Bunaciu, H. Aboul-Enein, H. Vu Dang, Vibrational Spectroscopy Applications in Biomedical, Pharmaceutical and Food Sciences, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2020, pp. 227-247.

B24 F. Marini, B. Walczak, “ANOVA-Target Projection (ANOVA-TP)”. In: S.D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (Eds.), Comprehensive Chemometrics, 2nd ed., Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2020, vol.1, pp. 495-520.

B25 F. Marini, B. Walczak, “Particle swarm optimization”. In: S.D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (Eds.), Comprehensive Chemometrics, 2nd ed., Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2020, vol.1, pp. 649-666.

B26 R. Vitale, P. Stefansson, F. Marini, C. Ruckebusch, I. Burud, H. Martens, “Fast Analysis, Processing and Modeling of Hyperspectral Videos: Challenges and Possible Solutions”. In: S.D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (Eds.), Comprehensive Chemometrics, 2nd ed., Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2020, vol. 4, pp. 395-409.

B27 F. Marini, “Non-linear modeling: Neural networks”. In: S.D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (Eds.), Comprehensive Chemometrics, 2nd ed., Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2020, vol. 3, pp. 519-541.

B28 A. Biancolillo, F. Marini, “Chemometric Classification Methods in Omic Data Analysis”. In: A. Cifuentes (Ed.), Comprehensive Foodomics, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, *in press* (doi: 10.1016/B978-0-08-100596-5.22903-X).

XVc – Curatela di libri

L01 F. Marini (Ed.), Chemometrics in Food Chemistry, Data Handling in Science and Technology series, vol. 28, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2013. ISBN 978-0444595287.

XVd – Proceedings su volume

- A01 D. Mott, F. Biasioli, F. Gasperi, E. Aprea, F. Marini, T.D. Märk “Characterization of strawberry genotypes by PTR-MS spectral fingerprinting”, *Acta Horticulturae*, **649** (2004), 65-68
- A02 F. Biasioli, F. Gasperi, E. Aprea, D. Mott, F. Marini, T.D. Märk “Characterization of strawberry genotypes: a three years study”, *Acta Horticulturae*, **708** (2006), 497-500
- A03 F. Marini, “Non-linear class-modeling using Artificial Neural Networks”, *Sixth International Conference on Fuzzy Systems and Knowledge Discovery, 2009. FSKD '09*, vol.7, IEEE Computer Society, Piscataway, NJ, 2009, pp.271-273.
- A04 S. Bellato, V. Del Frate, A. Conciatori, A. Cammerata, D. Sgrulletta, E. De Stefanis, A. D. Magri, F. Marini, “Comparison of near infrared transmittance and near infrared reflectance spectroscopy to select high nutritional value naked oats”, In: S. Saranwong, S. Kasemsumran, W. Thanapase, P. Williams (eds), *Near Infrared Spectroscopy: Proceedings of the 14th International Conference*, IM Publication, Chichester, UK, 2010, pp.415-420.
- A05 M. Ritota, S. Cozzolino, S. Marconi, P. Sequi, M. Valentini, F. Marini, “Metabolic profiling of sweet pepper (*Capsicum annum L.*) by means of HRMAS-NMR spectroscopy”, *Acta Horticulturae*, **932** (2012) 279-284.
- A06 F. Landolfo, F. Marini, A. Gowen, “Partial Least Squares Discriminant Analysis of Time Series Short Wave Infrared Images Reveals Slower Uptake of Water in Magnesium Oxychloride Cements Upon Addition of Phosphoric Acid”, In: Proceeding of the 10th Workshop on Hyperspectral Imaging and Signal Processing: Evolution in Remote Sensing (WHISPERS), Amsterdam, Netherlands, 2019, pp. 1-5. doi: 10.1109/WHISPERS.2019.8920968
- A07 M. Tomassetti, F. Marini, R. Angeloni, M. Castrucci L. Campanella, “New Chemometric Approach Using Data Obtained by a DMFC Device to Qualitatively and Quantitatively Determine Organic Molecules”. In: G. Di Francia, C. Di Natale, B. Alfano, S. De Vito, E. Esposito, G. Fattoruso, F. Formisano, E. Massera, M.L. Miglietta, T. Polichetti (eds) *Sensors and Microsystems. AISEM 2019. Lecture Notes in Electrical Engineering*, vol 629. Springer, Cham, 2020. https://doi.org/10.1007/978-3-030-37558-4_4

Roma, 6 aprile 2021

Federico Marini

