

Разрешение многомерных кривых (MCR)

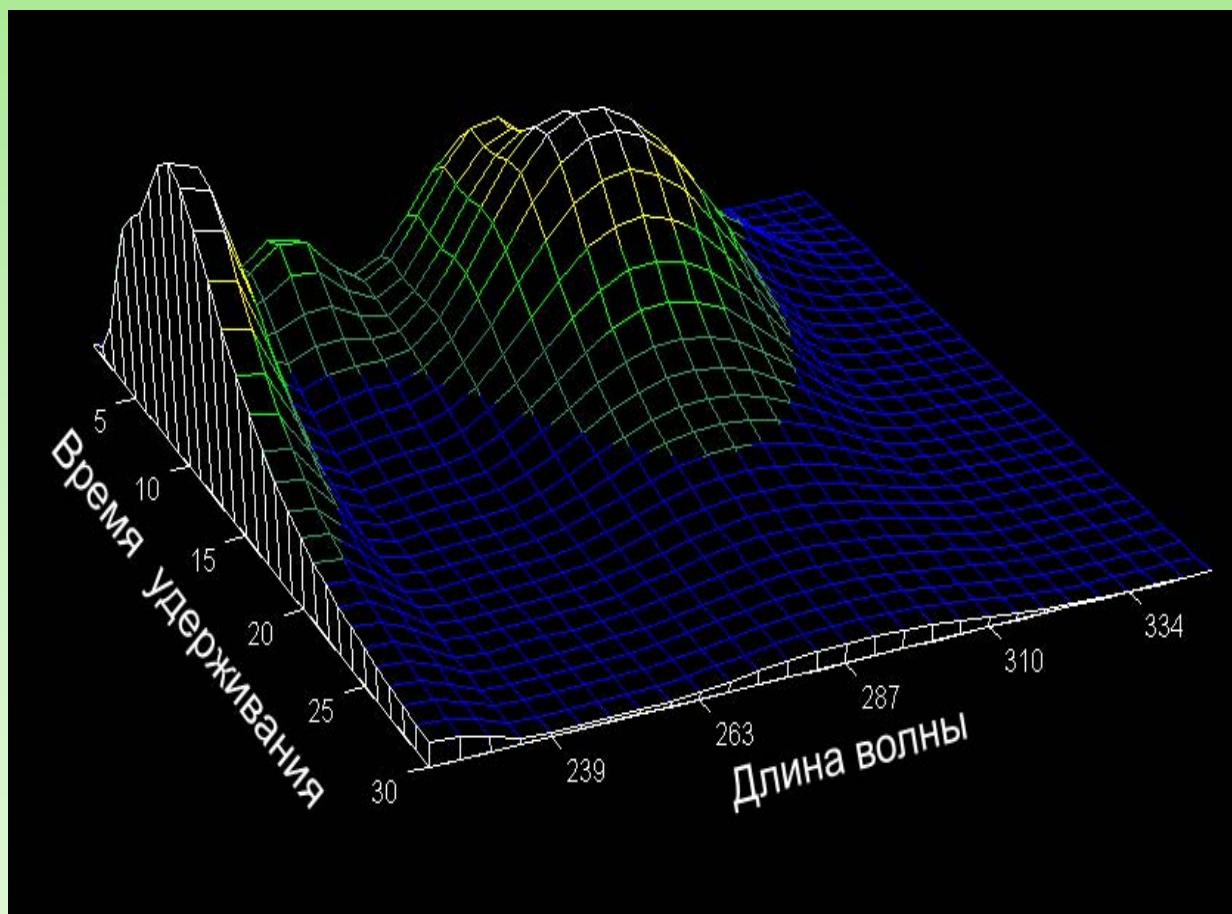
Алексей Померанцев



Институт
химической
физики РАН



Российское
хеометрическое
общество

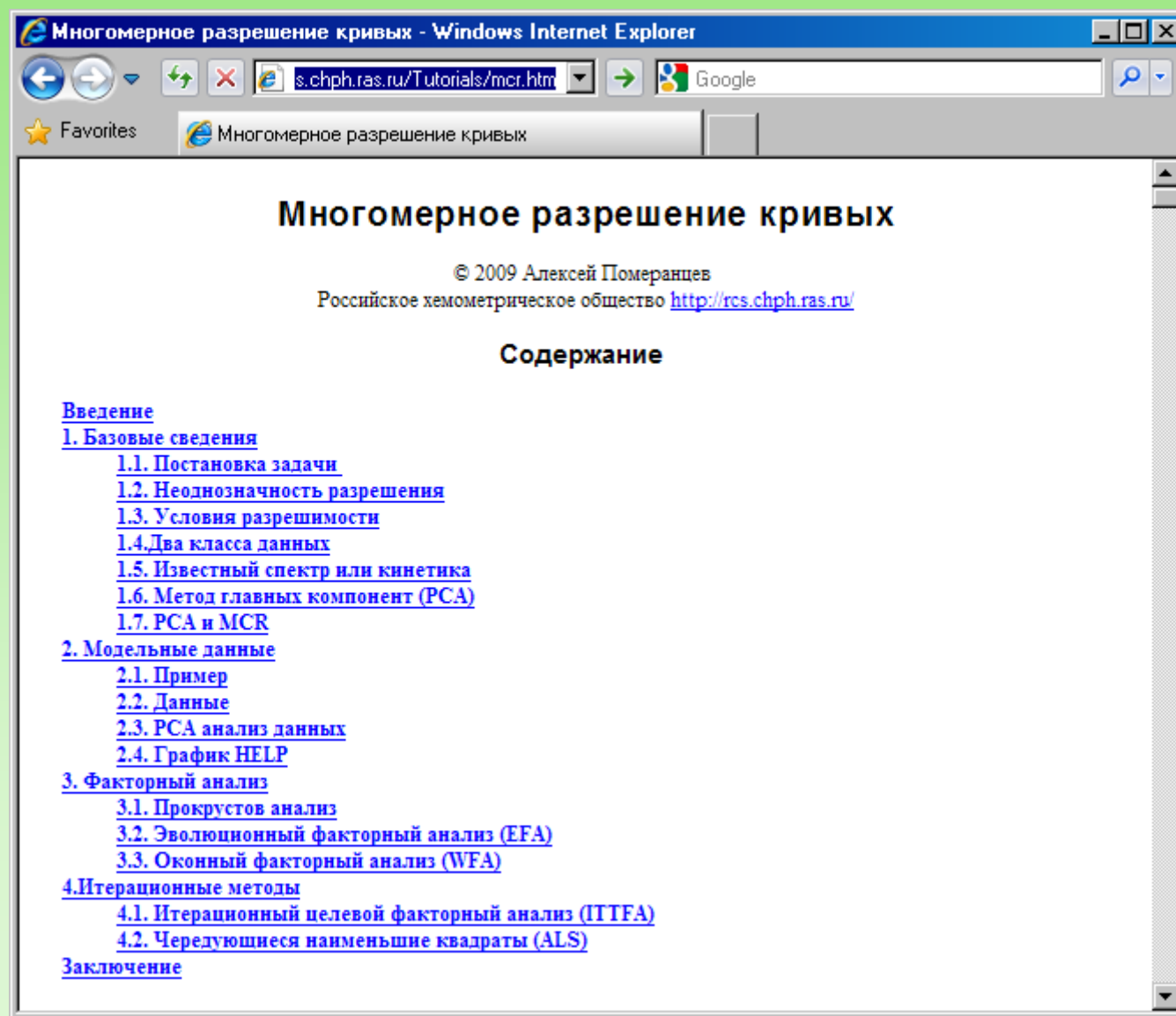


03.10.11

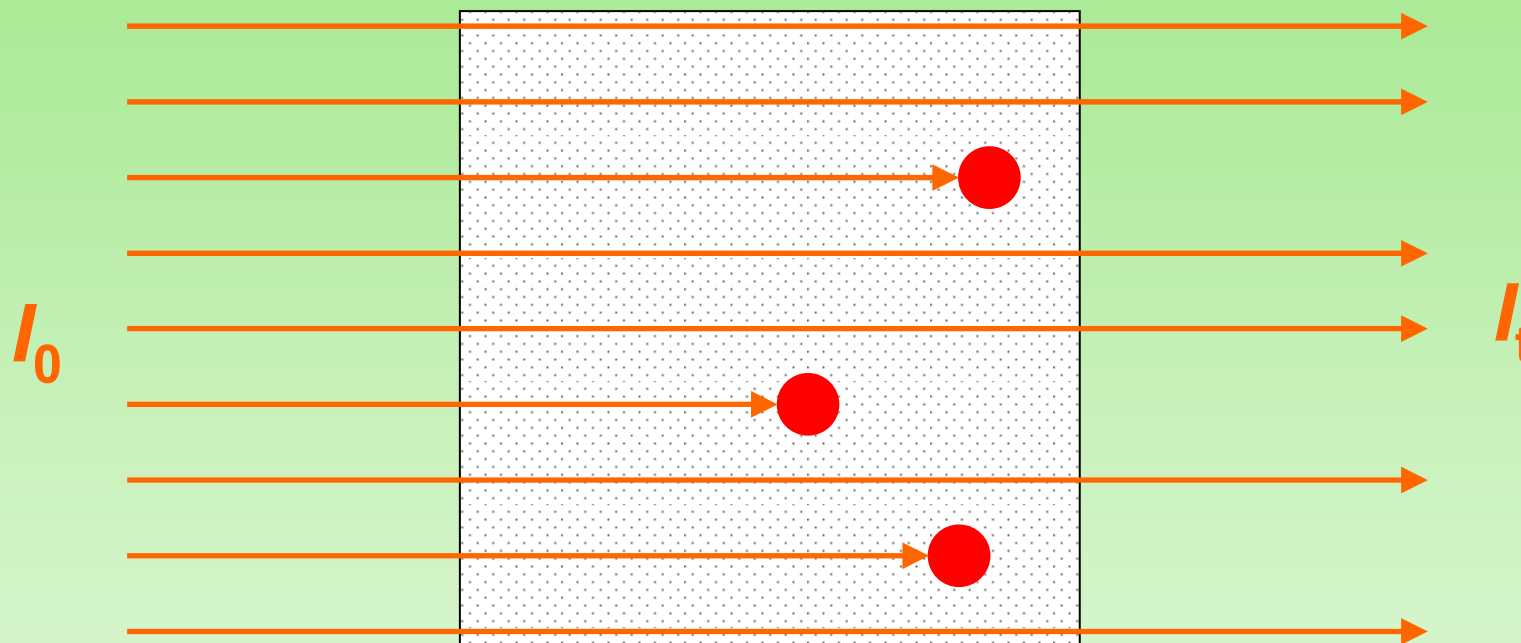
Лекция в Уфе

1

<http://rcs.chph.ras.ru/Tutorials/mcr.htm>

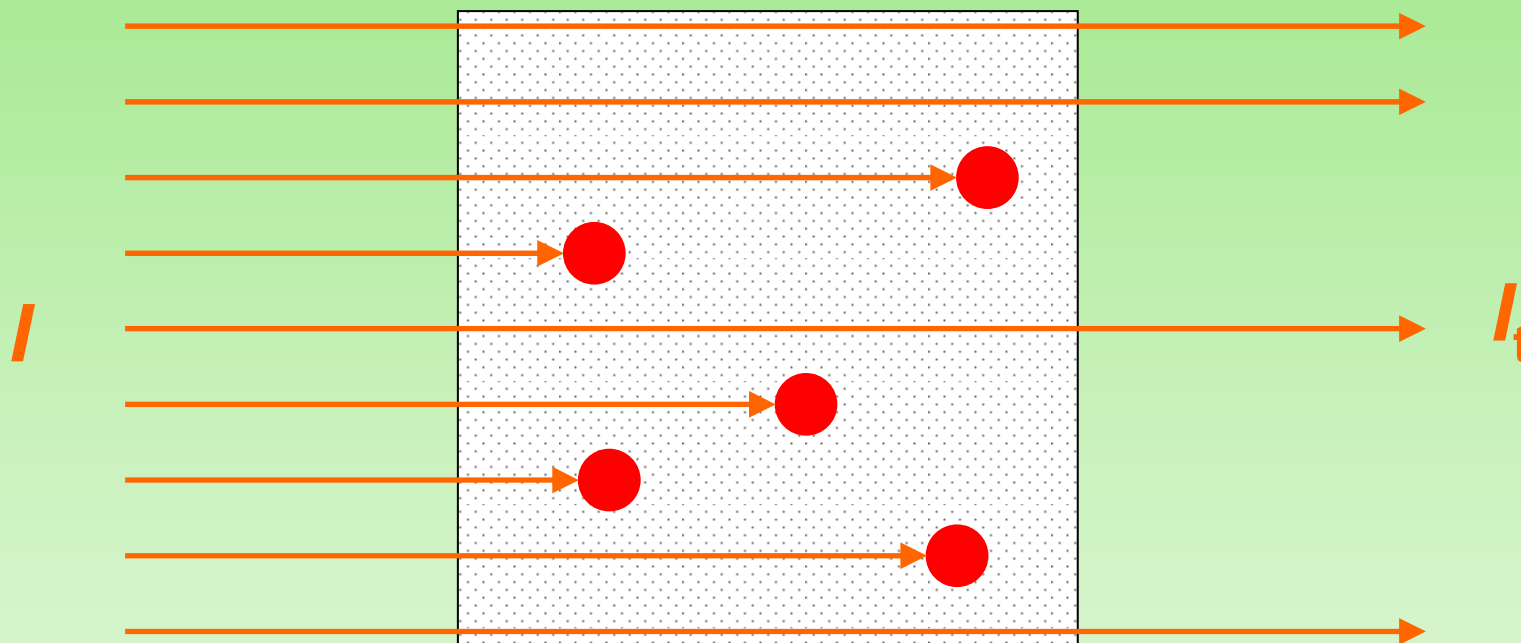


Закон Бугера — Ламберта — Бера



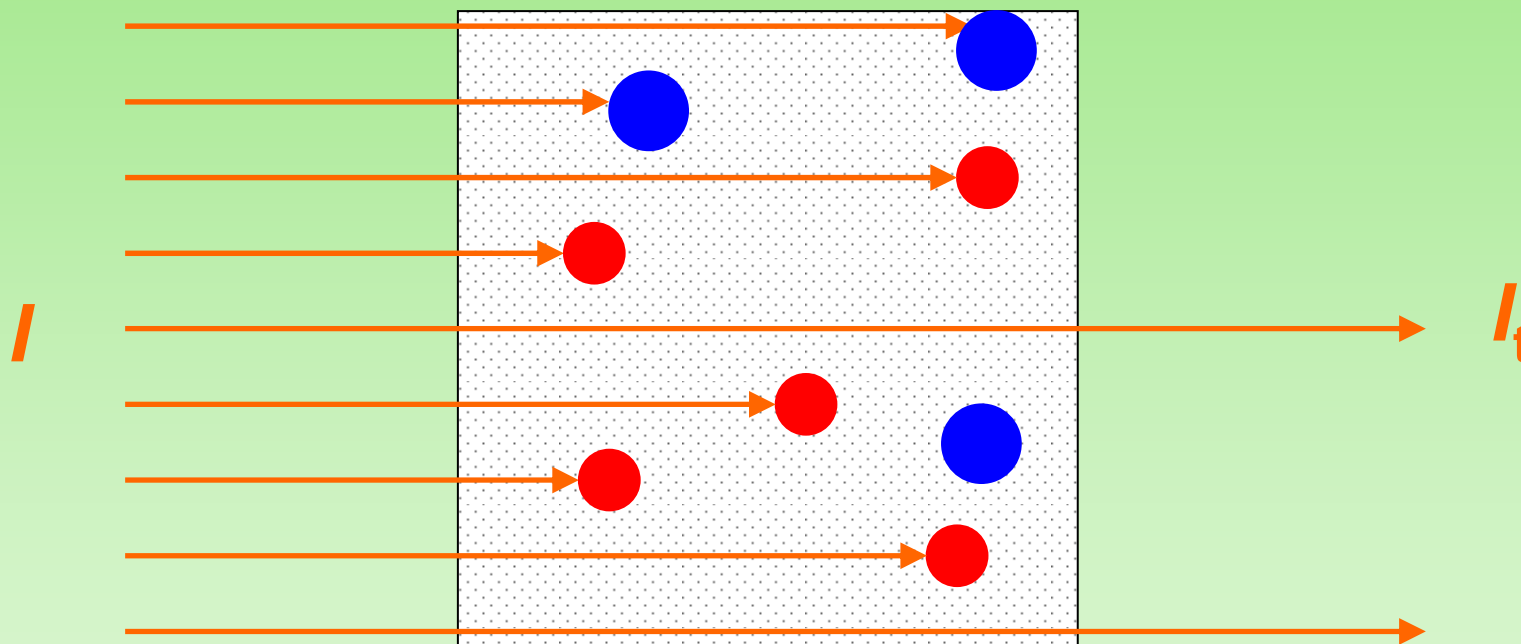
$$I_t = I_0 e^{-c(t)s(\lambda)}$$

Закон Бугера — Ламберта — Бера



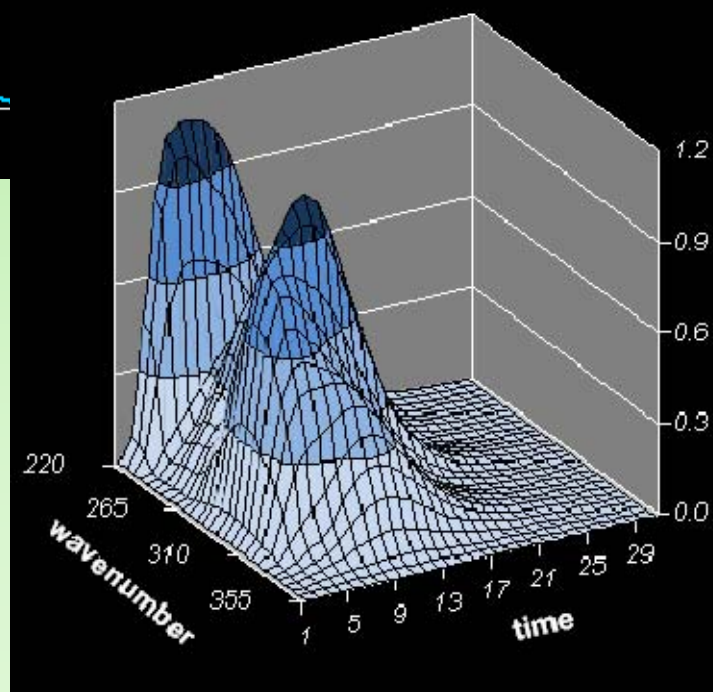
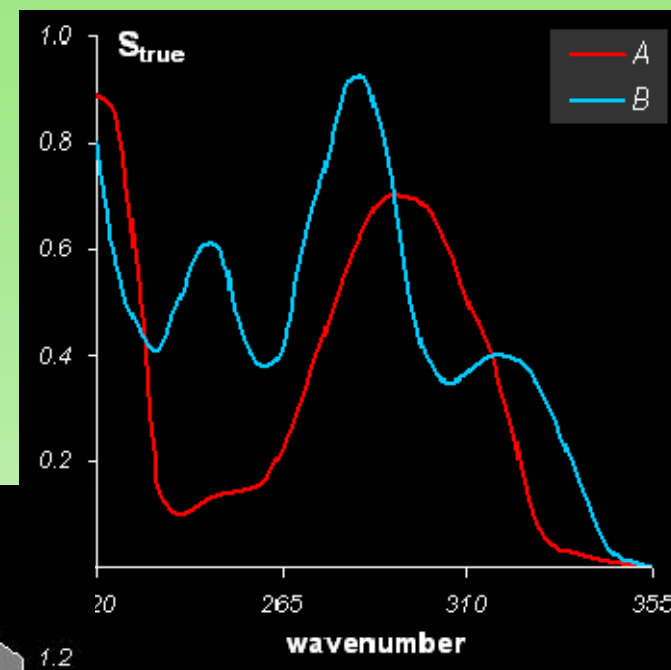
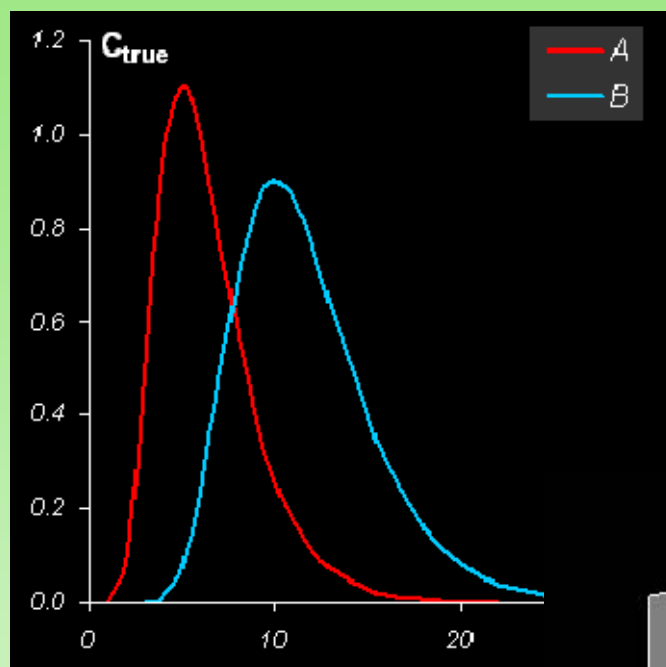
$$x(t, \lambda) = -\ln(I_t/I_0) = c(t)s(\lambda)$$

Закон Бугера — Ламберта — Бера



$$x(t, \lambda) = c_A(t)s_A(\lambda) + c_B(t)s_B(\lambda)$$

Устройство данных



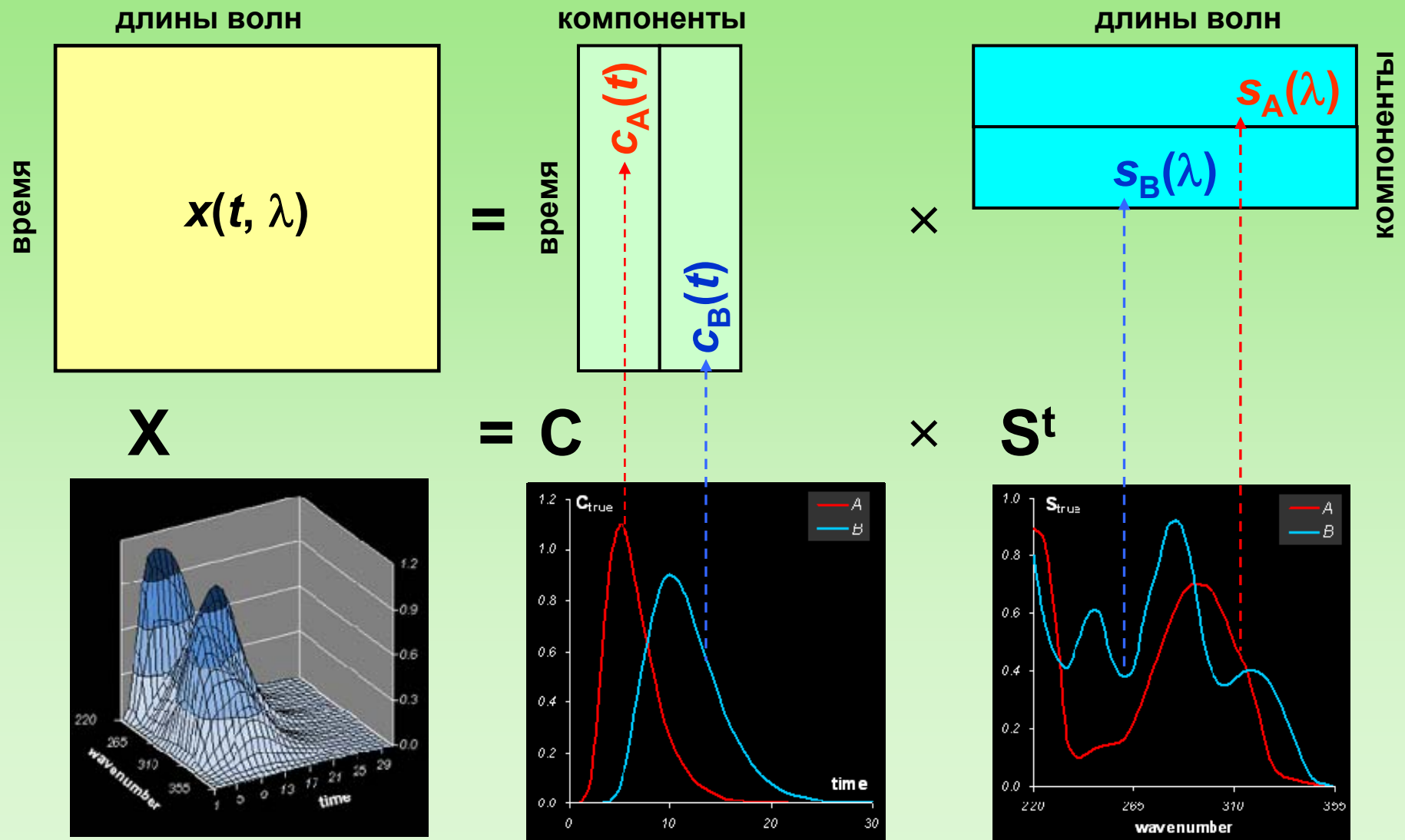
Постановка задачи

Данные, получаемые в эксперименте, можно представить в матричном виде –

$$\mathbf{X} = \mathbf{CS}^t + \mathbf{E}$$

Задача разрешения кривых (MCR) состоит в том, чтобы по заданной матрице данных \mathbf{X} определить число химических компонентов (A) и найти матрицы концентраций \mathbf{C} и чистых спектров \mathbf{S} .

Структура «хроматографических» данных



Неоднозначность решения

$$X = CS^t + E$$

$$X = \tilde{C}\tilde{S}^t + E$$

Вращательная неопределенность

Пусть R – это ортогональная матрица вращения размерностью $A \times A$, т.е. такая матрица, что $R^t = R^{-1}$. Тогда

$$CS^t = CRR^tS^t = (CR)(SR)^t = \tilde{C}\tilde{S}^t$$

Масштабная неопределенность

Пусть R – это диагональная матрица размерностью $A \times A$. Тогда

$$CS^t = CRR^{-1}S^t = (CR)(SR^{-1})^t = \tilde{C}\tilde{S}^t$$

Глобальная неопределенность

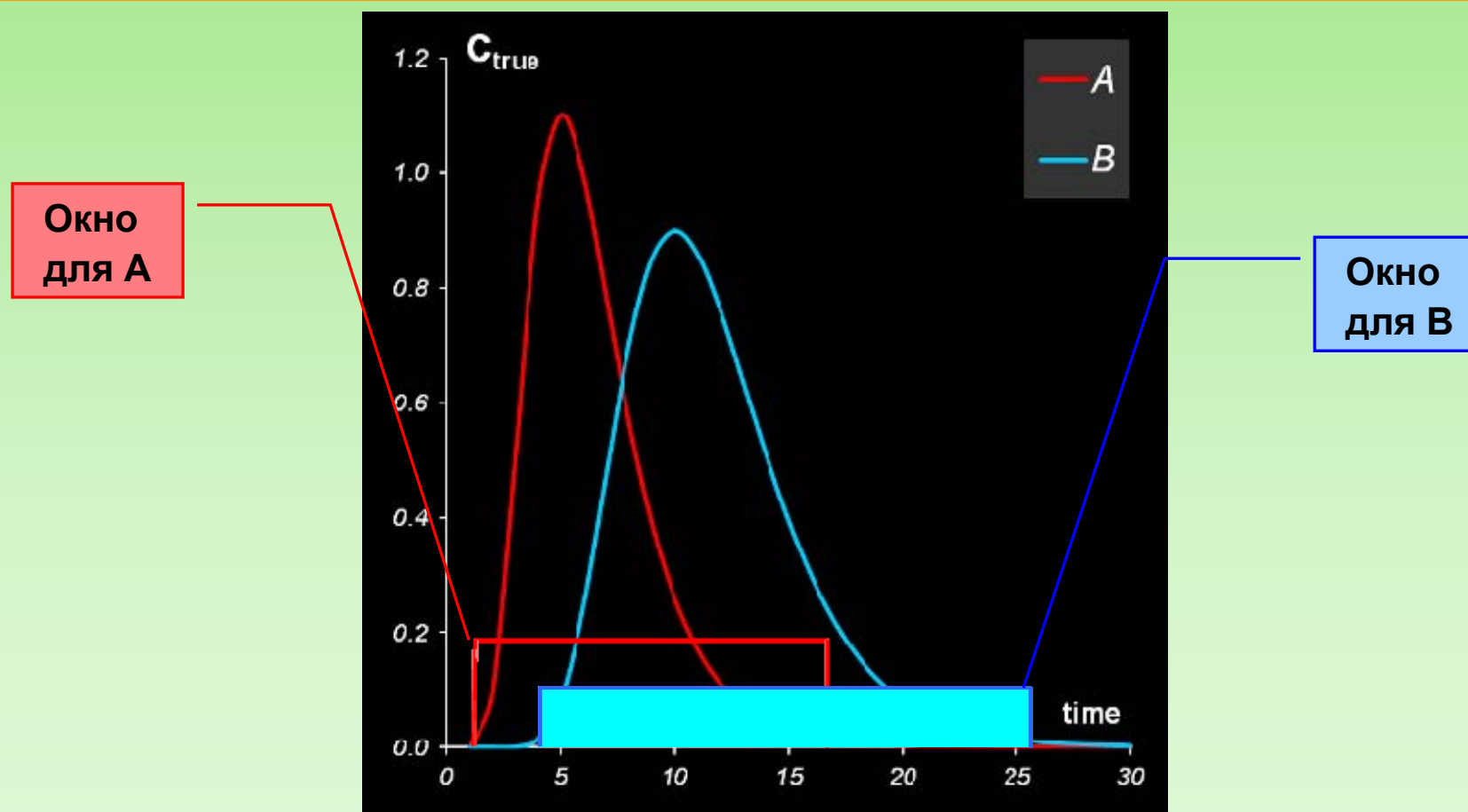
Избавиться от масштабной неопределенности нельзя. Любое найденное решение будет определено только с точностью до умножения на константу,

$$x_{ij} = \sum_{a=1}^A c_{ia} s_{aj} = \sum_{a=1}^A \left(\frac{c_{ia}}{r_a} \right) (s_{aj} r_a) .$$

Иными словами каждый профиль концентраций c_a может быть в r_a раз меньше, если соответствующий чистый спектр s_a увеличен в r_a раз. Однако форма кинетики и спектра при этом сохраняется.

Разрешимость: окно

Концентрационное (спектральное) окно для химического компонента a – это область переменных (соответственно t или λ), для которой величина соответствующего чистого сигнала (кинетики или спектра) больше нуля.

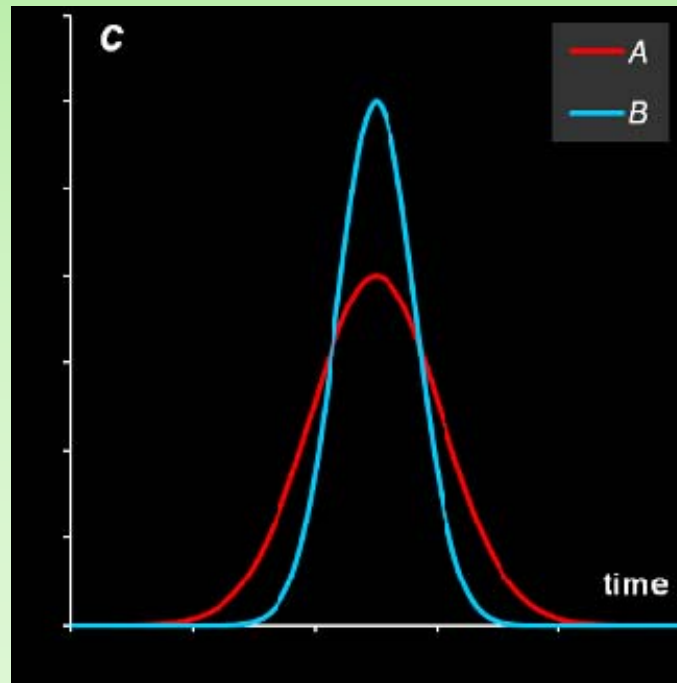


Условия разрешимости

1. Концентрационный профиль компонента может быть восстановлен, если все остальные концентрационные окна, пересекающиеся с окном этого компонента, имеют участки вне этого окна.
2. Спектральный профиль компонента может быть восстановлен, если его концентрационное окно не находится целиком внутри концентрационного окна какого-нибудь другого компонента.

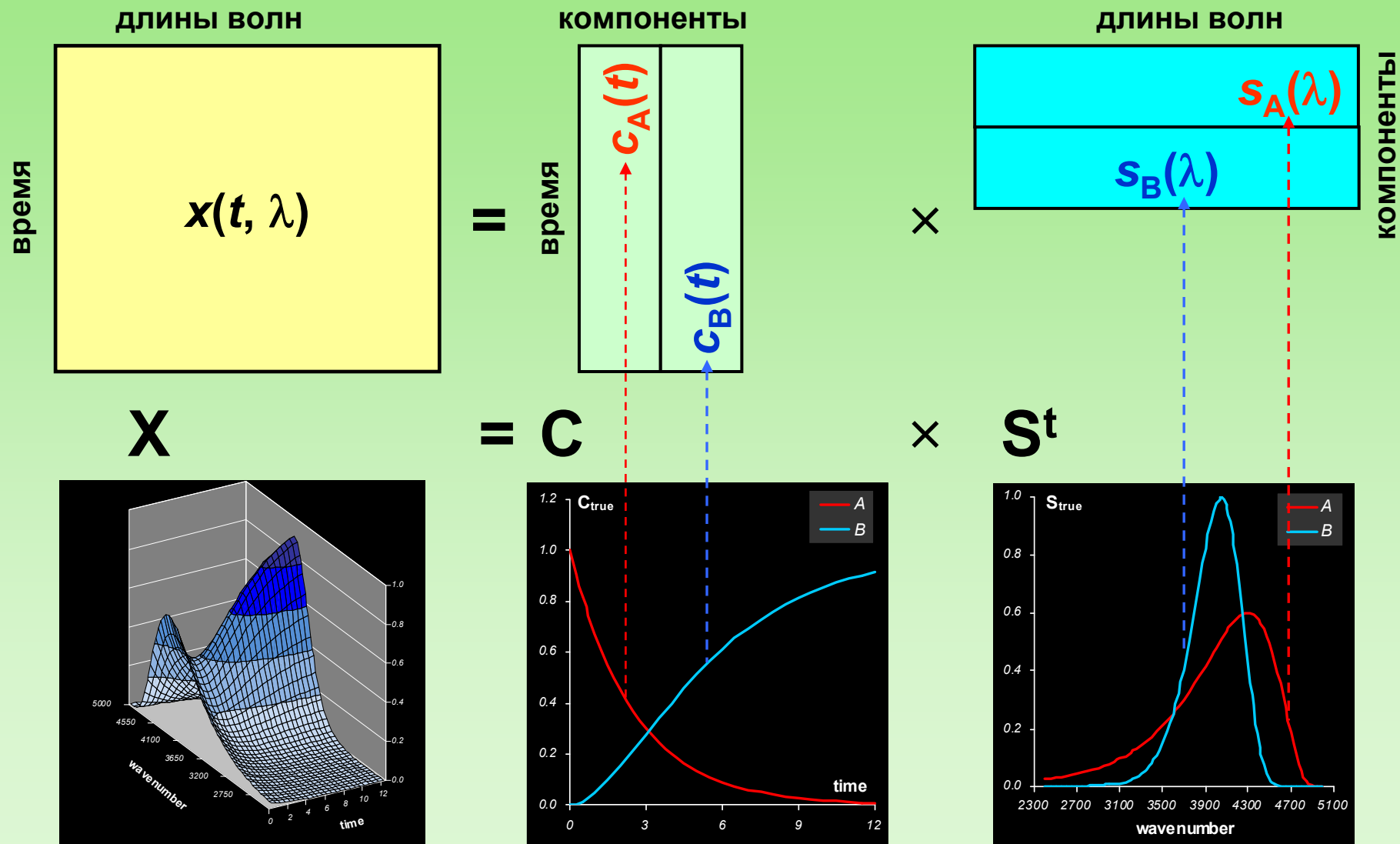


Roll Manne, 1978



Можно восстановить концентрационный профиль **B**, но нельзя найти его чистый спектр. С другой стороны, для **A** можно найти чистый спектр, но нельзя найти концентрационный профиль.

Структура «кинетических» данных



Частные решения задачи

Нужно решить задачу

$$\mathbf{X} = \mathbf{C}\mathbf{S}^t$$

Если известен спектр \mathbf{S} , тогда

$$\mathbf{C}_{\text{hat}} = \mathbf{X}\mathbf{S}(\mathbf{S}^t\mathbf{S})^{-1}$$

Если известна кинетика \mathbf{C} , тогда

$$\mathbf{S}_{\text{hat}} = \mathbf{X}^t\mathbf{C}(\mathbf{C}^t\mathbf{C})^{-1}$$

Методы разрешения кривых

Факторные

- Прокрустово вращение
- Эволюционный факторный анализ (EFA)
- Оконный факторный анализ (WFA)

Итерационные

- Итерационный целевой факторный анализ (ITTFA)
- Чередующиеся наименьшие квадраты (ALS)

Метод главных компонент (PCA)

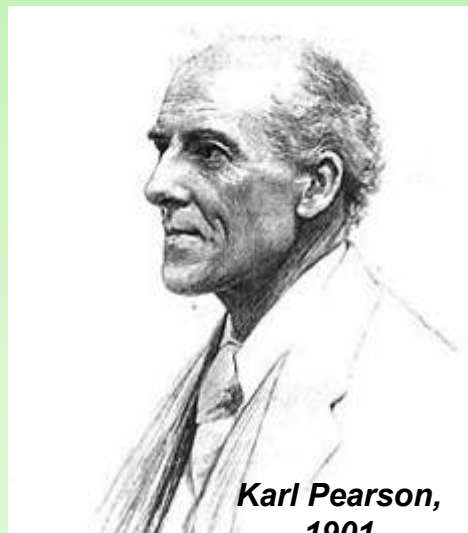
Исходные
данные

Матрица
счетов

Матрица
нагрузок

Матрица
ошибок

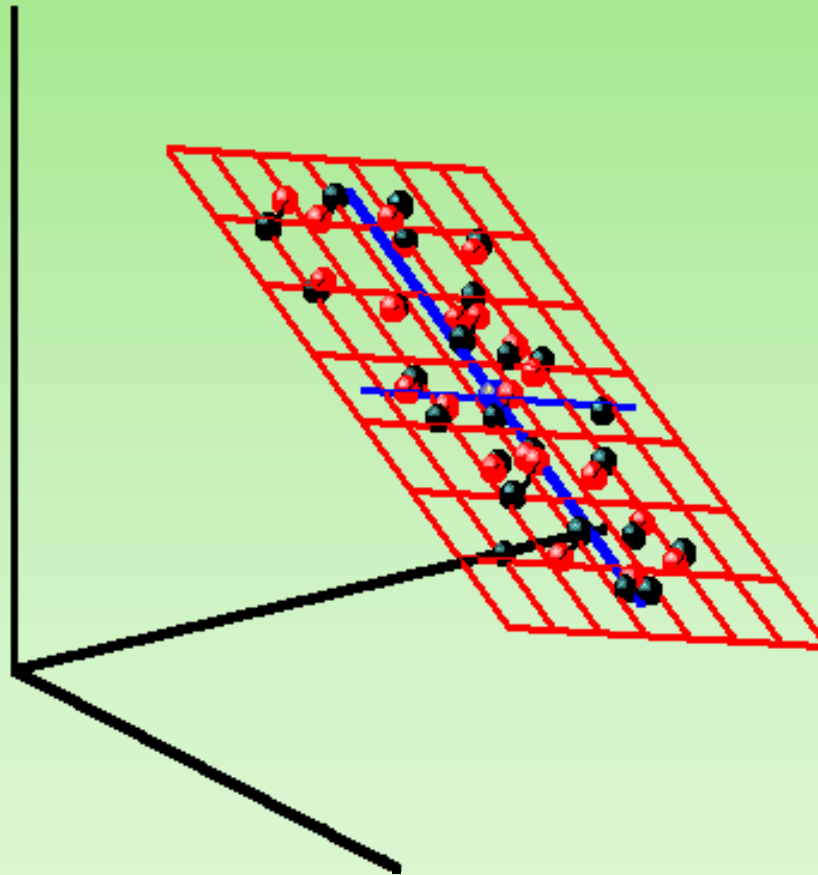
$$\begin{matrix} I \\ \boxed{\mathbf{X}} \end{matrix} = \begin{matrix} I \\ \boxed{\mathbf{T}} \\ A \end{matrix} \times \begin{matrix} A & J \\ \boxed{\mathbf{P}} & \boxed{\mathbf{\Gamma}} \\ A & \end{matrix} + \begin{matrix} I \\ \boxed{\mathbf{E}} \\ J \end{matrix}$$



Karl Pearson,
1901

$$\mathbf{X} = \mathbf{T}\mathbf{P}^T + \mathbf{E}$$

Представление данных в подпространстве



Матрица счетов T (scores)

$$X = TP^t + E$$



Строка –
координаты одного
объекта в новой
системе координат

Столбец –
проекция всех
объектов на одну
ось главных
компонент

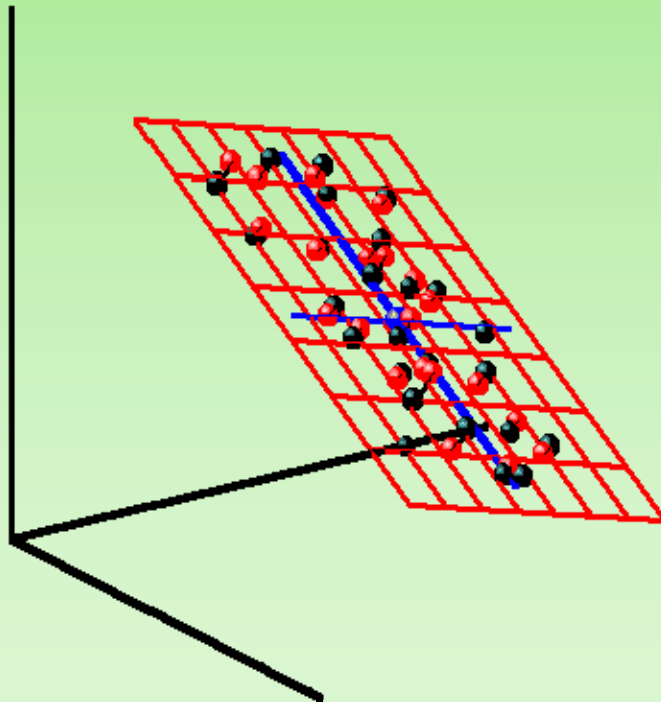
A

t_{11}	...	t_{A1}
t_{21}	...	t_{A1}
t_{I1}	...	t_{IA}

I

Матрица нагрузок P (loadings)

Строка –
проекция всех
переменных на
одну ось главных
компонент



A

$$X = TP^t + E$$

p_{11}	p_{12}		...	p_{1J}
...
p_{A1}	p_{A2}		...	p_{AJ}

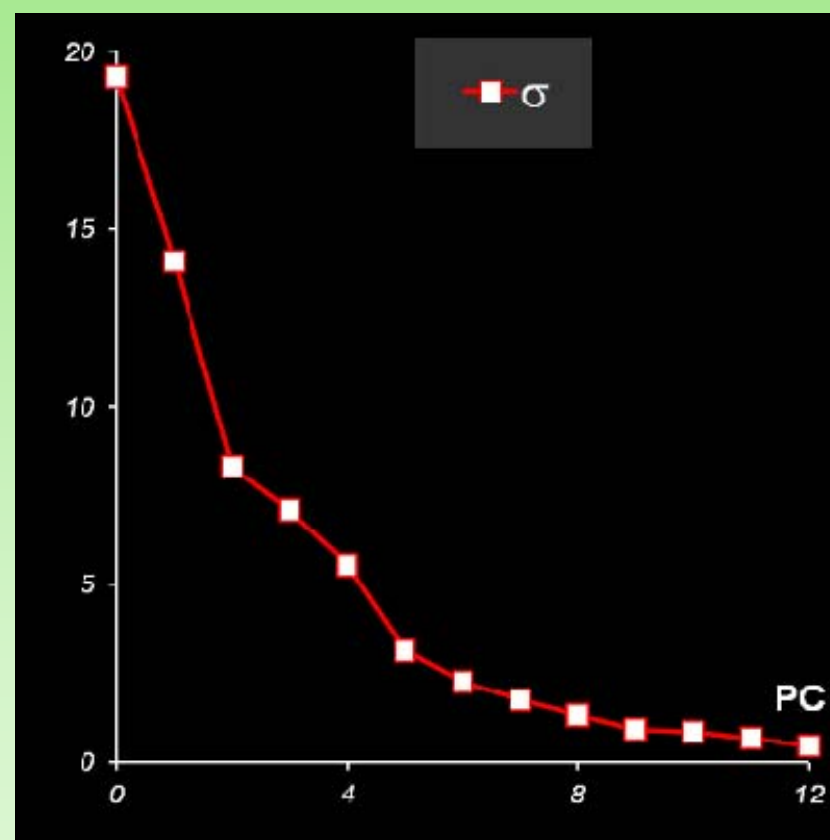
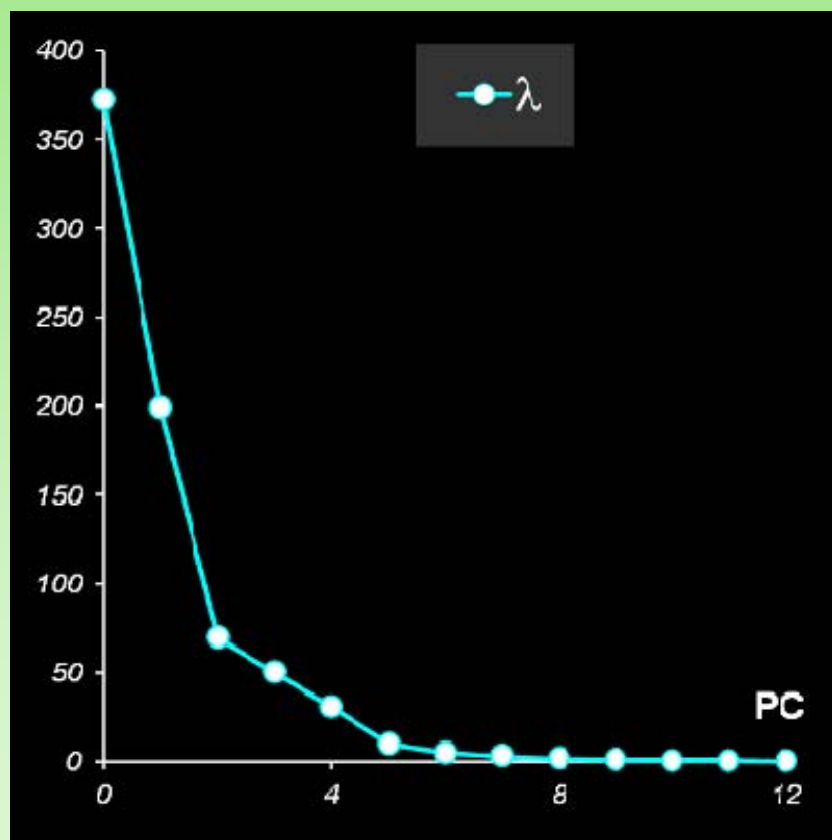
J

Столбец –
проекция одной
переменной на новую
систему координат

Собственные и сингулярные значения

$$\mathbf{T}^t \mathbf{T} = \mathbf{\Lambda} = \text{diag}\{\lambda_1, \dots, \lambda_A\}$$

$$\sigma_a = \sqrt{\lambda_a}$$

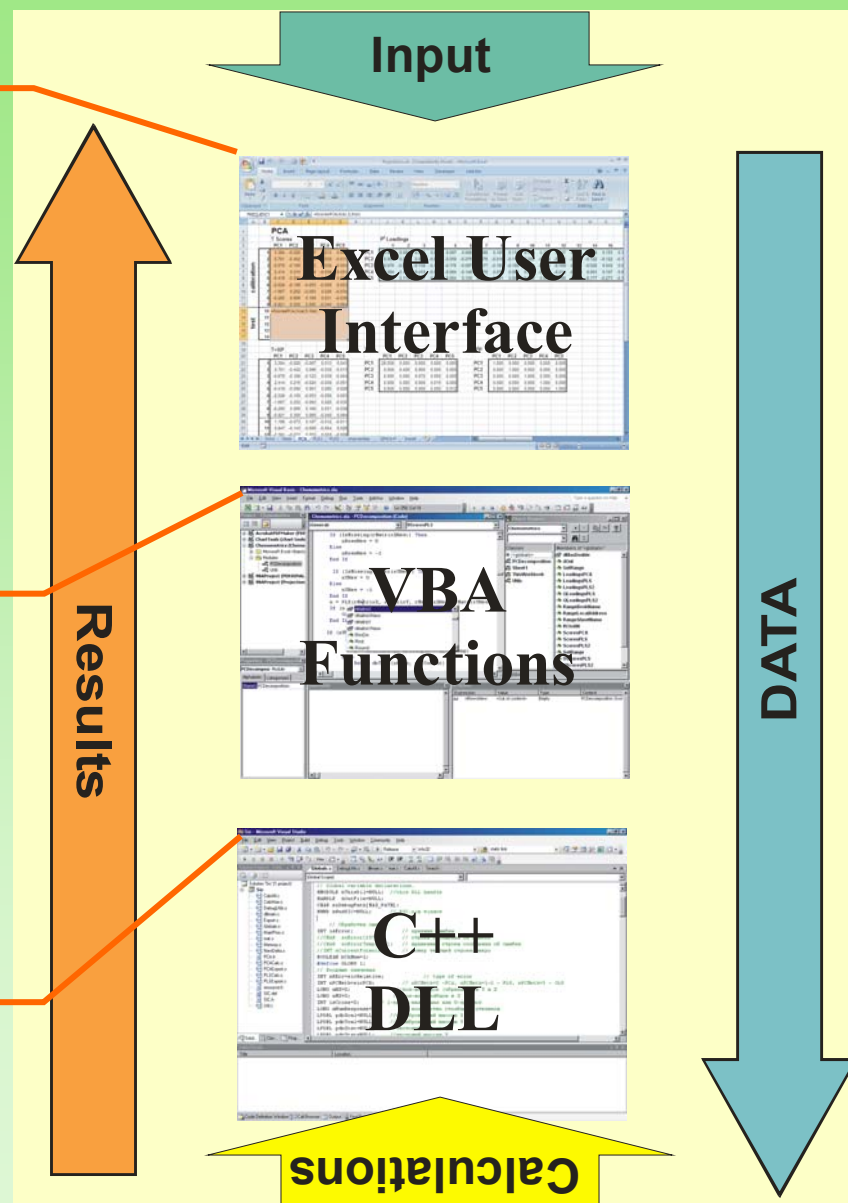


Chemometrics Add-in for Excel

Позволяет пользователю использовать все возможности Excel: расчеты, стандартные функции, графики, и т.п.

Программирование в VBA помогает упростить работу

Все вычисления выполняются очень быстро – «на лету».



Матричные вычисления в Excel

=**{TRANSPOSE(B6:F10)}**

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
5		A						A^T					
6		0.81	1.52	0.12	0.20	0.31		0.81	3.50	0.20	2.65	0.32	
7		3.50	4.10	5.01	9.70	0.21		1.52	4.10	0.09	0.75	0.46	
8		0.20	0.09	0.08	1.32	4.65		0.12	5.01	0.08	0.33	3.91	
9		2.65	0.75	0.33	0.75	1.05		0.20	9.70	1.32	0.75	6.81	
10		0.31	0.21	0.08	0.75	1.42		0.31	0.21	0.08	0.51	0.11	
12		B						AB^T					
13		1.42	1.86	1.11	0.83	0.51		=MMULT(B6:F10,TRANSPOSE(B))					
14		1.25	6.35	2.37	4.34	2.28		26.31	84.87	114.35	133.35	111.44	
15		8.27	6.62	1.46	1.61	6.22		4.02	17.34	33.93	50.12	18.53	
16		7.16	1.75	1.98	7.68	8.17		6.66	14.46	37.20	36.10	13.44	
17		0.46	5.44	0.63	8.67	1.39		12.04	45.36	57.69	86.36	66.09	
18													

=**{MMULT(B6:F10,TRANSPOSE(B))}**

МГК: функция ScoresPCA

		X values																	
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
calibration	1	0.51	0.52	0.59	0.63	0.67	0.67	0.71	0.76	0.82	0.84	0.91	0.95	0.99	1.02	1.05	1.11	1.13	1.17
	2	0.31	0.34	0.34	0.37	0.43	0.46	0.48	0.47	0.53	0.53	0.58	0.62	0.63	0.67	0.70	0.72	0.77	0.79
	3	0.28	0.27	0.31	0.29	0.32	0.35	0.36	0.36	0.40	0.41	0.42	0.41	0.42	0.42	0.45	0.45	0.45	0.48
	4	0.42	0.46	0.48	0.54	0.55	0.57	0.63	0.66	0.67	0.71	0.75	0.81	0.84	0.86	0.89	0.93	0.97	0.98
	5	0.28	0.29	0.31	0.32	0.34	0.34	0.32	0.35	0.37	0.39	0.39	0.40	0.45	0.47	0.48	0.52	0.53	0.53
	6	0.13	0.13	0.13	0.13	0.13	0.13	0.16	0.12	0.15	0.17	0.17	0.17	0.18	0.17	0.16	0.17	0.16	0.16
	7	0.22	0.21	0.23	0.19	0.21	0.20	0.23	0.23	0.22	0.25	0.26	0.25	0.23	0.25	0.26	0.26	0.24	0.23
	8	0.29	0.26	0.30	0.29	0.30	0.32	0.32	0.32	0.35	0.35	0.37	0.40	0.42	0.46	0.51	0.52	0.55	0.58
	9	0.23	0.25	0.23	0.24	0.25	0.29	0.24	0.28	0.27	0.28	0.31	0.31	0.33	0.32	0.34	0.35	0.38	0.42
test	10	0.34	0.38	0.40	0.43	0.46	0.48	0.46	0.50	0.57	0.58	0.59	0.64	0.68	0.66	0.74	0.75	0.82	0.85
	11	0.35	0.39	0.39	0.42	0.44	0.48	0.52	0.49	0.56	0.59	0.61	0.64	0.66	0.65	0.68	0.71	0.77	0.80
	12	0.16	0.14	0.16	0.16	0.14	0.13	0.16	0.12	0.13	0.13	0.13	0.13	0.13	0.13	0.15	0.19	0.20	0.18
	13	0.32	0.32	0.36	0.38	0.40	0.42	0.43	0.42	0.45	0.45	0.49	0.51	0.51	0.51	0.56	0.57	0.62	0.61
	14	0.47	0.52	0.54	0.58	0.63	0.69	0.74	0.78	0.82	0.86	0.91	0.97	1.01	1.07	1.11	1.16	1.21	1.27

		PC1 PC2 PC3 PC4 PC5				
calibration	1	3.384	-0.020	-0.067	0.013	0.043
	2	0.701	-0.402	0.066	-0.038	-0.013
	3	-0.678	-0.166	-0.123	0.039	-0.004
	4	2.414	0.215	-0.024	-0.039	-0.051
	5	-0.419	-0.090	0.067	0.065	0.029
	6	-2.529	-0.156	-0.063	-0.058	0.003
	7	-1.667	0.252	-0.093	0.026	-0.030
	8	-0.285	0.066	0.168	0.031	-0.039
	9	-0.921	0.300	0.065	-0.040	0.064
test	10	1.196	-0.073	0.107	-0.012	-0.011
	11	0.947	-0.143	-0.069	-0.004	0.028
	12	-2.391	-0.033	0.053	0.028	-0.009
	13	0.437	0.287	-0.018	-0.019	0.024
	14	2.996	-0.783	0.011	0.003	-0.007

Стандар-
тизация
данных

=ScoresPCA(Xcal,5,1,Xtst)

A

МГК: функция LoadingsPCA

		X values																	
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
calibration	1	0.51	0.52	0.59	0.63	0.67	0.67	0.71	0.76	0.82	0.84	0.91	0.95	0.99	1.02	1.05	1.11	1.13	1.17
	2	0.31	0.34	0.34	0.37	0.43	0.46	0.48	0.47	0.53	0.53	0.58	0.62	0.63	0.67	0.70	0.72	0.77	0.79
	3	0.28	0.27	0.31	0.29	0.32	0.35	0.36	0.36	0.40	0.41	0.42	0.41	0.42	0.42	0.45	0.45	0.45	0.48
	4	0.42	0.46	0.48	0.54	0.55	0.57	0.63	0.66	0.67	0.71	0.75	0.81	0.84	0.86	0.89	0.93	0.97	0.98
	5	0.28	0.29	0.31	0.32	0.34	0.34	0.32	0.35	0.37	0.39	0.39	0.40	0.45	0.47	0.48	0.52	0.53	0.53
	6	0.13	0.13	0.13	0.13	0.13	0.13	0.16	0.12	0.15	0.17	0.17	0.17	0.18	0.17	0.16	0.17	0.16	0.16
	7	0.22	0.21	0.23	0.19	0.21	0.20	0.23	0.23	0.22	0.25	0.26	0.25	0.23	0.25	0.26	0.26	0.24	0.23
	8	0.29	0.26	0.30	0.29	0.30	0.32	0.32	0.32	0.35	0.35	0.37	0.40	0.42	0.46	0.51	0.52	0.55	0.58
	9	0.23	0.25	0.23	0.24	0.25	0.29	0.24	0.28	0.27	0.28	0.31	0.31	0.33	0.32	0.34	0.35	0.38	0.42
test	10	0.34	0.38	0.40	0.43	0.46	0.48	0.46	0.50	0.57	0.58	0.59	0.64	0.68	0.66	0.74	0.75	0.82	0.85
	11	0.35	0.39	0.39	0.42	0.44	0.48	0.52	0.49	0.56	0.59	0.61	0.65	0.66	0.65	0.68	0.71	0.77	0.80
	12	0.16	0.14	0.16	0.16	0.14	0.13	0.16	0.12	0.13	0.13	0.15	0.16	0.16	0.13	0.15	0.19	0.20	0.18
	13	0.32	0.32	0.36	0.38	0.40	0.42	0.43	0.42	0.45	0.45	0.49	0.54	0.53	0.52	0.56	0.57	0.62	0.61
	14	0.47	0.52	0.54	0.58	0.63	0.69	0.74	0.78	0.82	0.86	0.91	0.97	1.01	1.07	1.11	1.16	1.21	1.27

D4		{=TRANSPOSE(LoadingsPCA(Xcal,5,1))}																	
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
4	PC1	0.058	0.064	0.071	0.083	0.087	0.086	0.098	0.107	0.114	0.116	0.125	0.137	0.143	0.149	0.153	0.163	0.171	0.174
5	PC2	0.009	0.021	0.002	-0.005	-0.050	-0.075	-0.076	-0.018	-0.112	-0.085	-0.089	-0.100	-0.108	-0.122	-0.122	-0.119	-0.136	-0.136
6	PC3	-0.076	-0.074	-0.138	-0.148	-0.176	-0.097	-0.217	-0.191	-0.188	-0.274	-0.245	0.169	-0.109	-0.026	0.042	0.039	0.208	0.244
7	PC4	0.384	0.103	0.413	-0.089	-0.094	-0.149	-0.078	0.076	0.085	0.039	-0.075	-0.214	-0.139	0.003	0.107	0.083	-0.069	-0.132
8	PC5	-0.001	0.110	0.007	-0.013	0.064	0.130	-0.344	-0.041	0.008	-0.046	0.058	-0.190	0.006	-0.177	-0.273	-0.131	-0.135	0.059

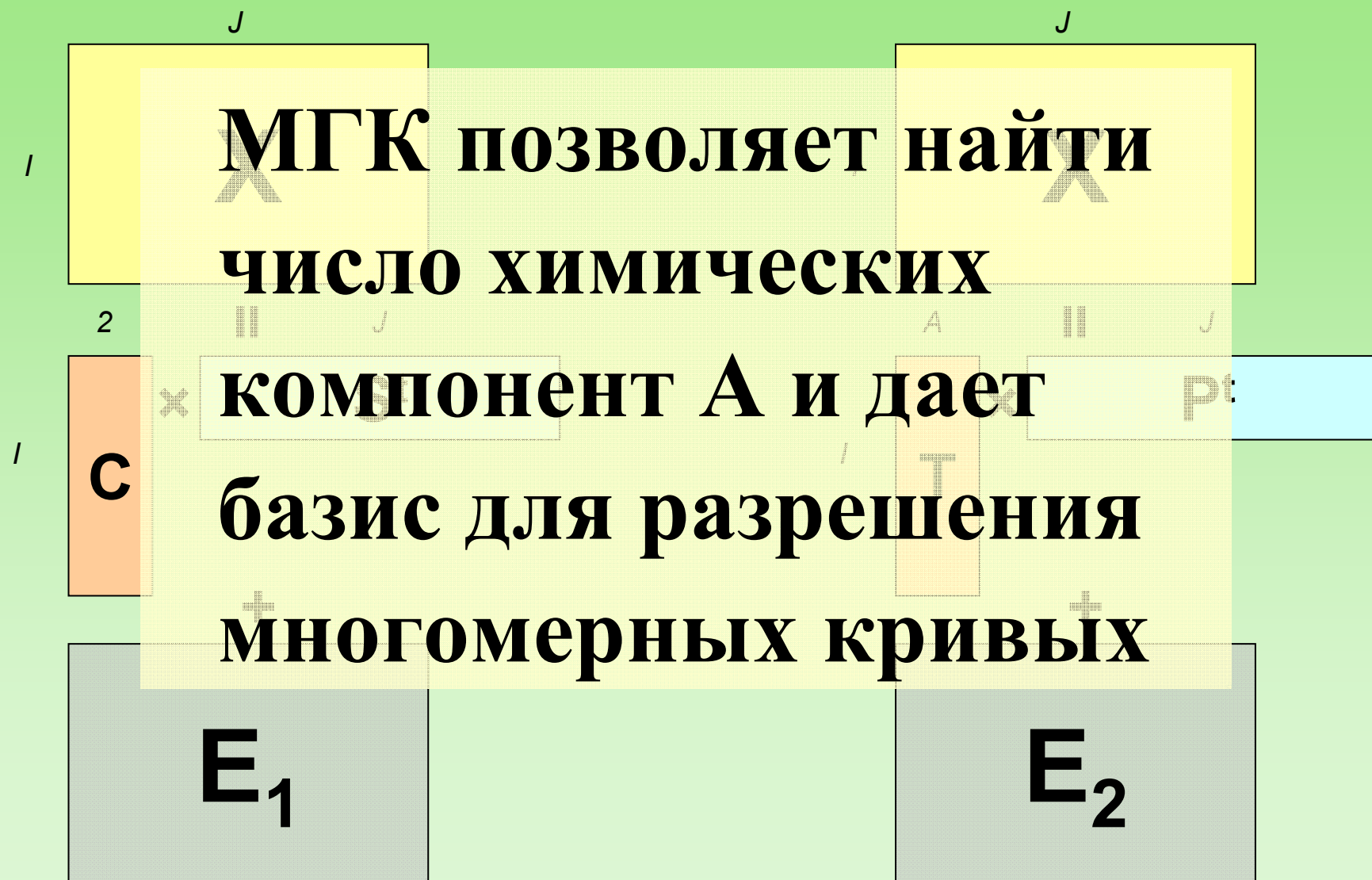
=TRANSPOSE(LoadingsPCA(Xcal,5,1))

Стандартная функция
Excel

A

Стандар-
тизация
данных

Факторный анализ и анализ ГК



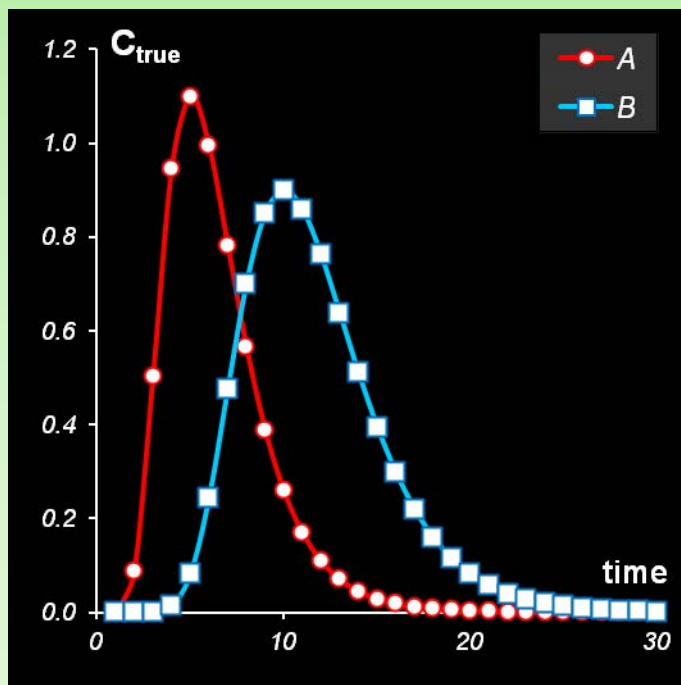
Модельные данные

Прообразом для модельного примера служит задача разделения пиков в высокоэффективной жидкостной хроматографии с детектированием на диодной матрице (ВЭЖХ-ДДМ). В системе имеются два вещества А и В, с профилями элюции $c_A(t)$ и $c_B(t)$. Тогда спектр смеси

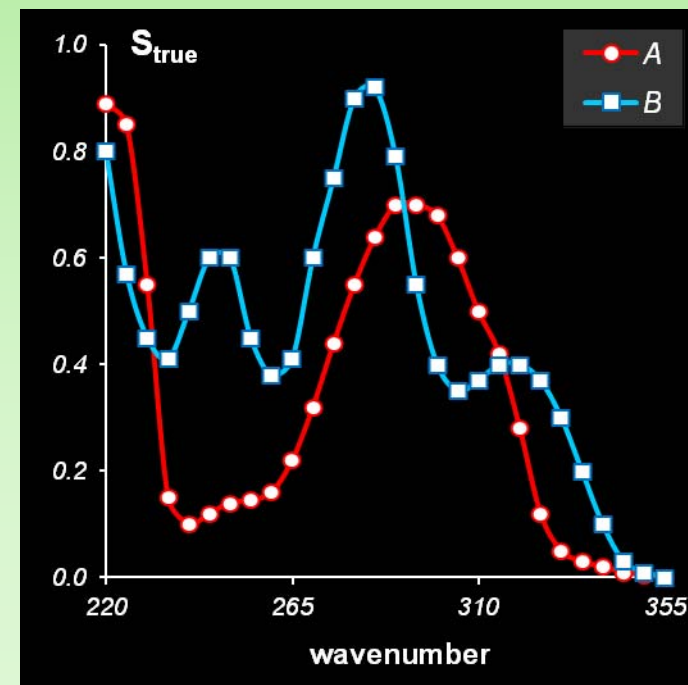
$$x = c_A \cdot s_A + c_B \cdot s_B,$$

где s_A и s_B – спектры чистых веществ.

Профили элюции

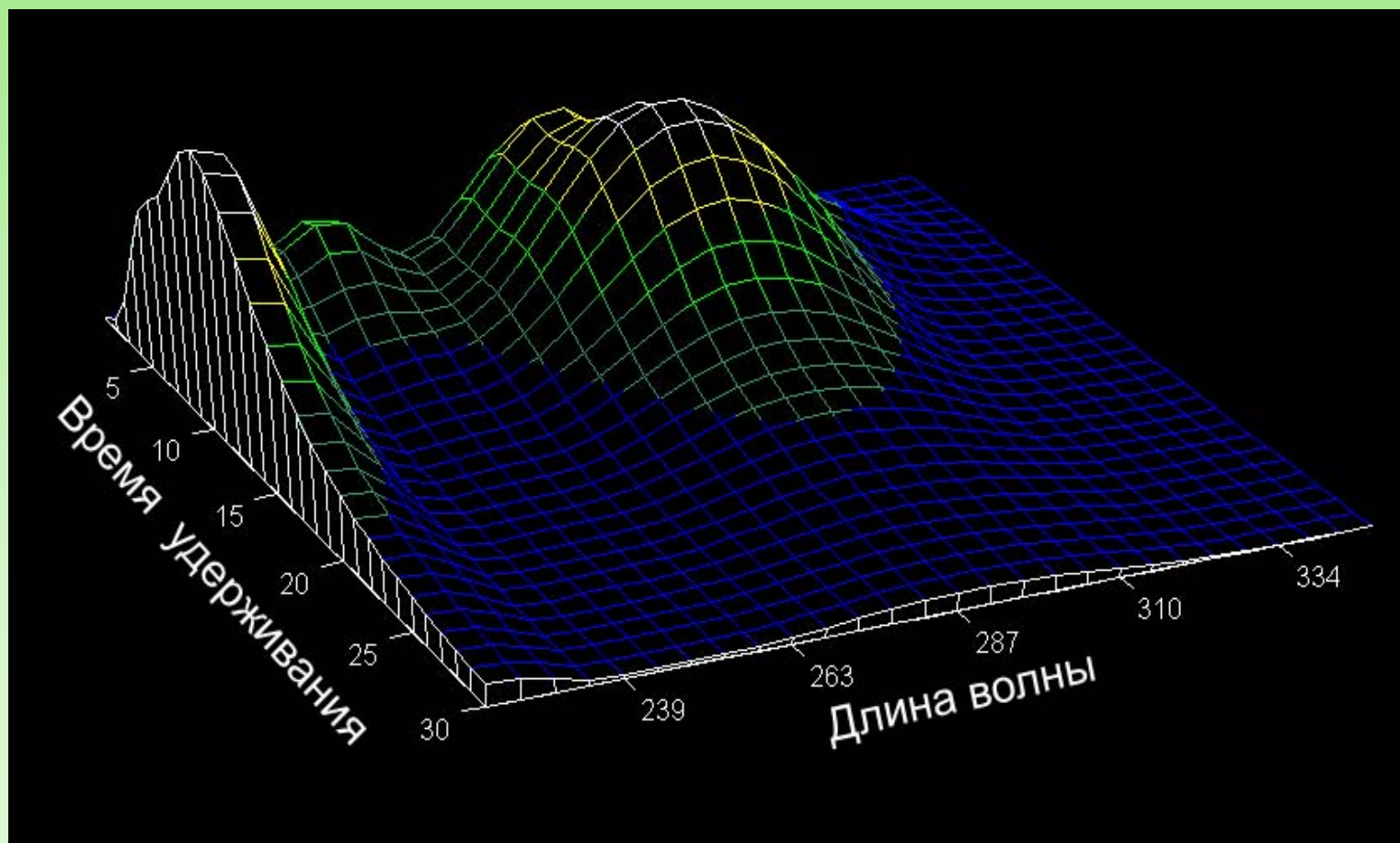


Спектры чистых компонентов



Хроматограмма смеси

$$\mathbf{X} = \mathbf{C}\mathbf{S}^t + \mathbf{E}$$



Метод главных компонент

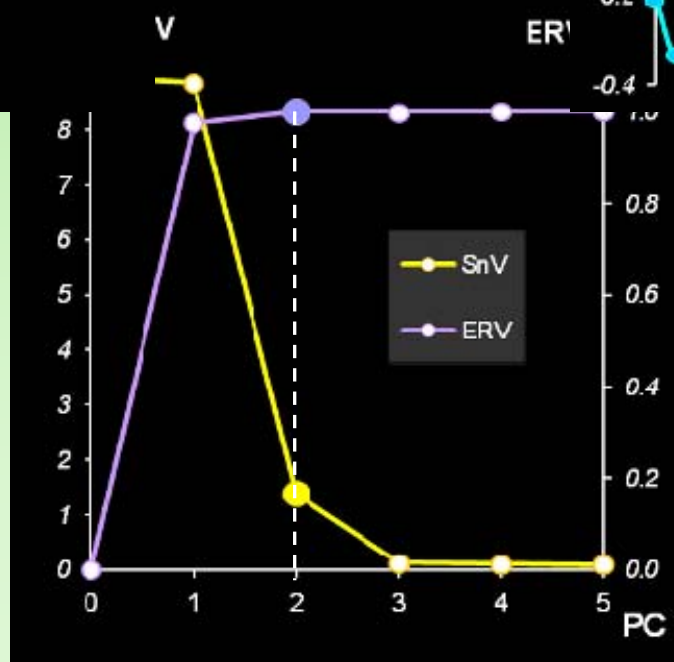
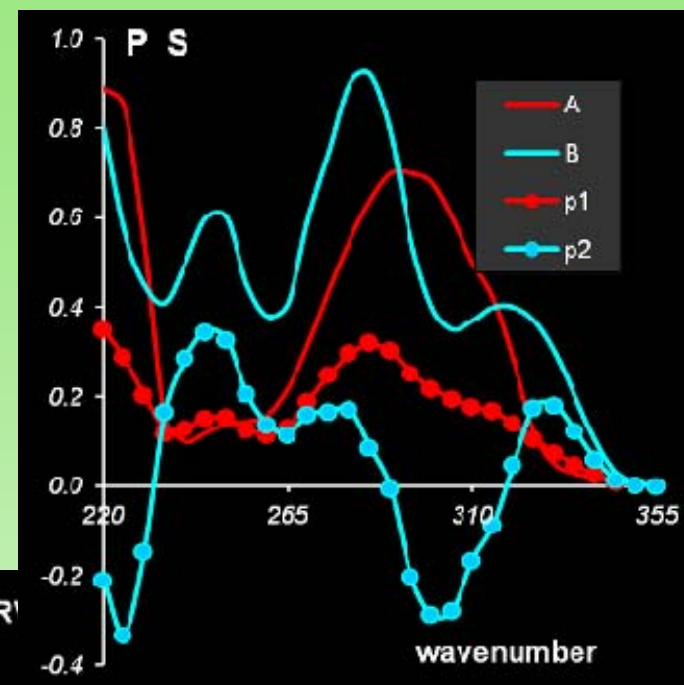
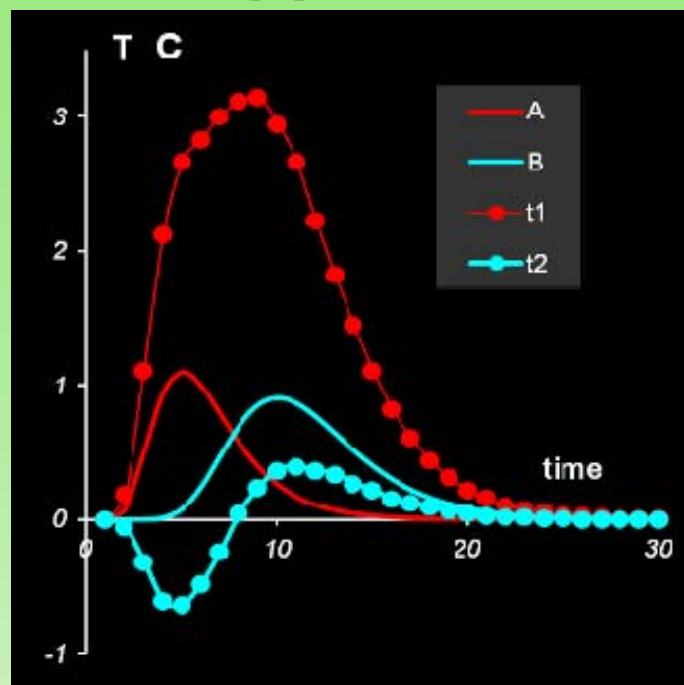
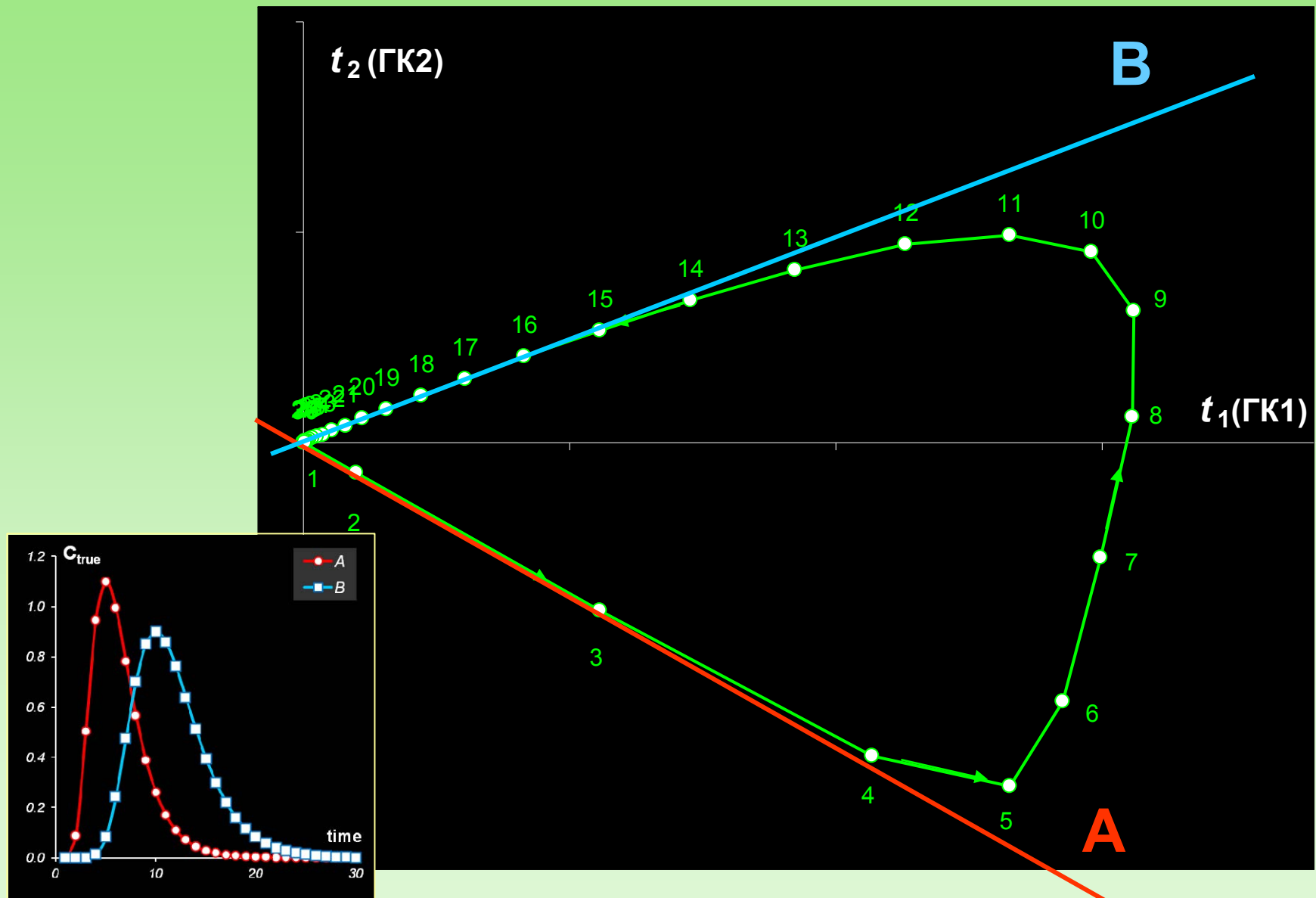


График счетов



03.10.11

Лекция в Уфе

29

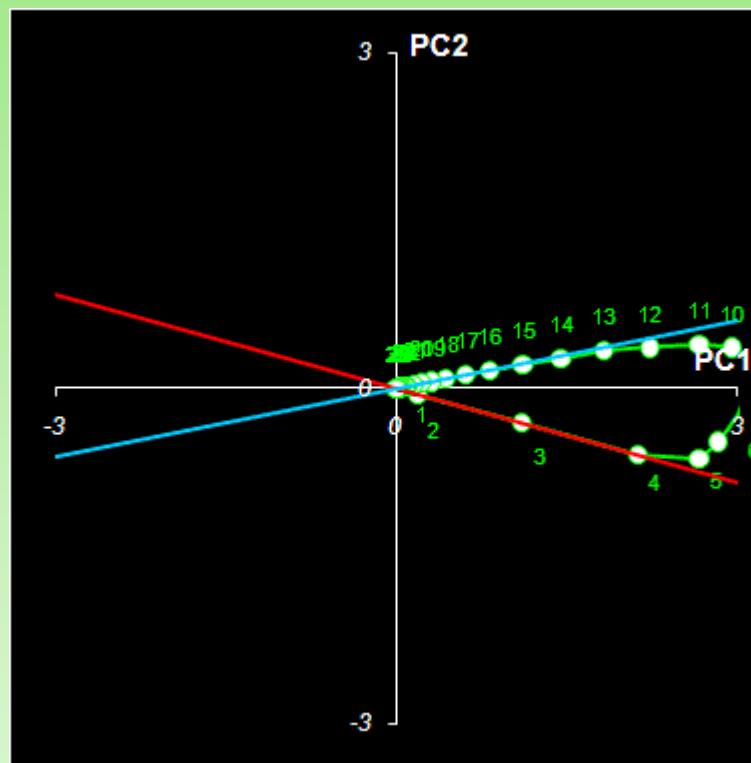
Выводы из графика счетов

1. линейные участки = чистые компоненты
2. кривые участки = коэлюция
3. ближе к началу = меньше интенсивность
4. число поворотов = число чистых компонент

Прокрустово преобразование

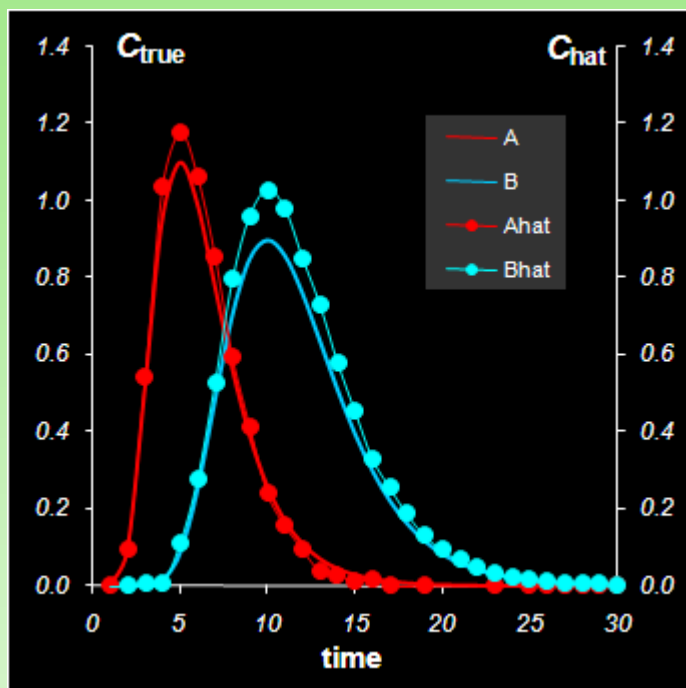


Προκρούστης, 13 в. до н.э.

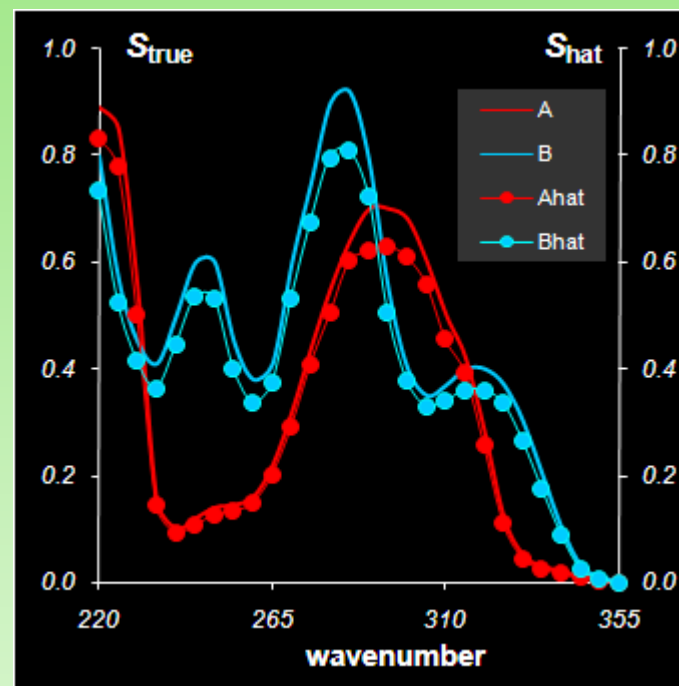


Результат

Профили элюции



Спектры чистых компонент



$$C_{hat} = TR_1 R_2 = TR$$

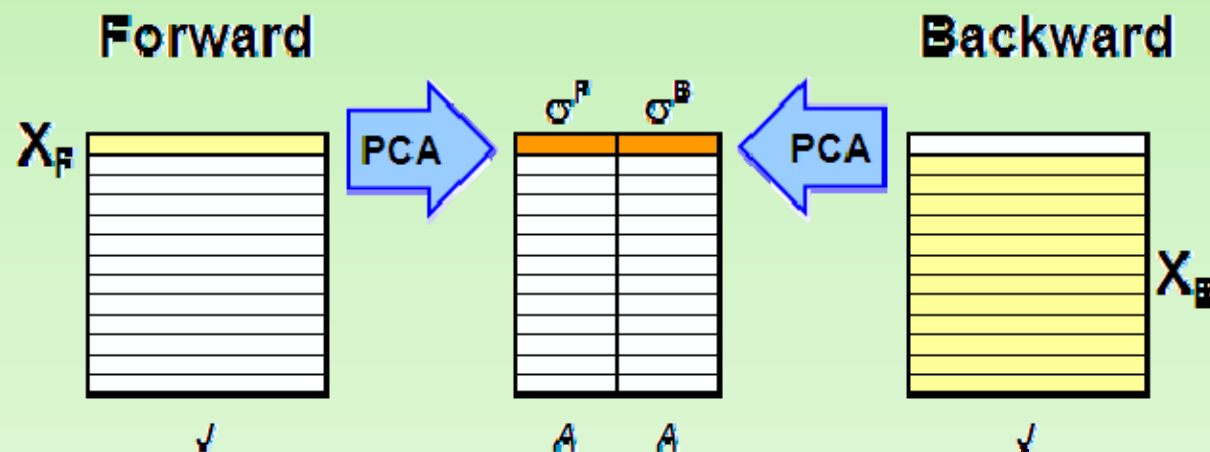
$$S_{hat} = P(R^t)^{-1}$$

Эволюционный факторный анализ (EFA)

Главная идея *эволюционного факторного анализа* (EFA, Evolving factor analysis) состоит в том, что метод главных компонент применяется не ко всей матрице X , а к последовательности ее подматриц. В методе EFA используют две последовательности: расширяющаяся матрица (*прямой проход*) и сокращающаяся матрица (*обратный проход*). К каждой подматрице из последовательности применяется PCA и определяются соответствующие сингулярные значения (с.з.) $\sigma_1, \dots, \sigma_A$.

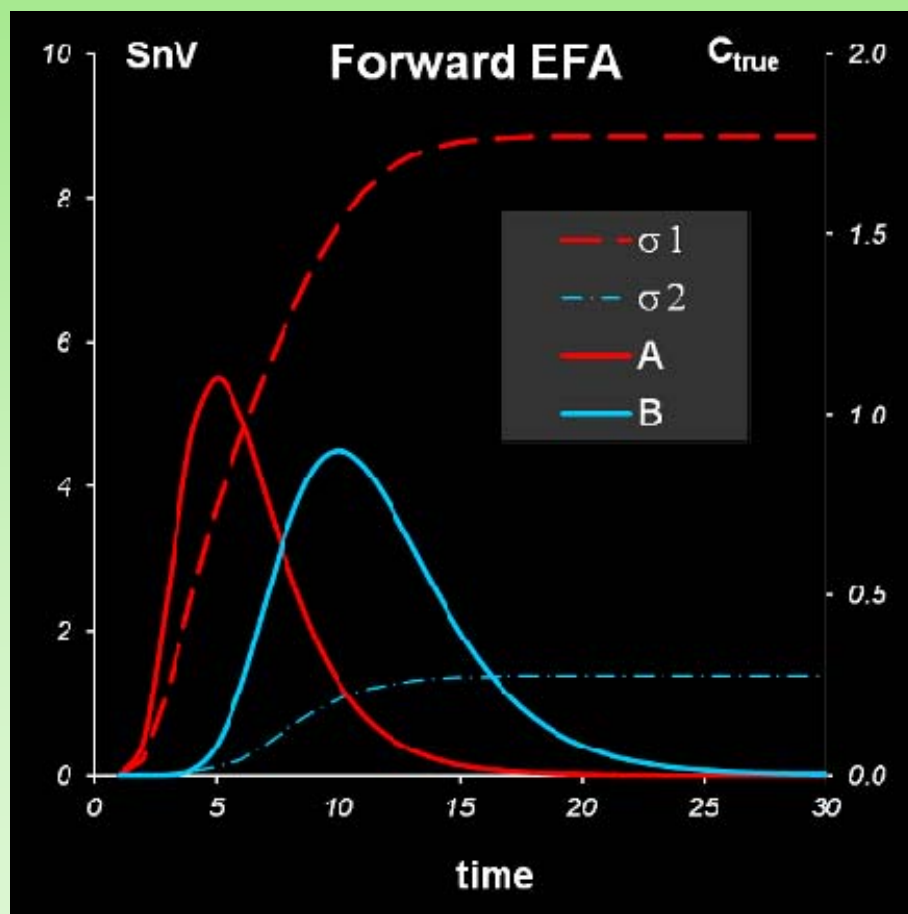


Marcel Maeder, 1987

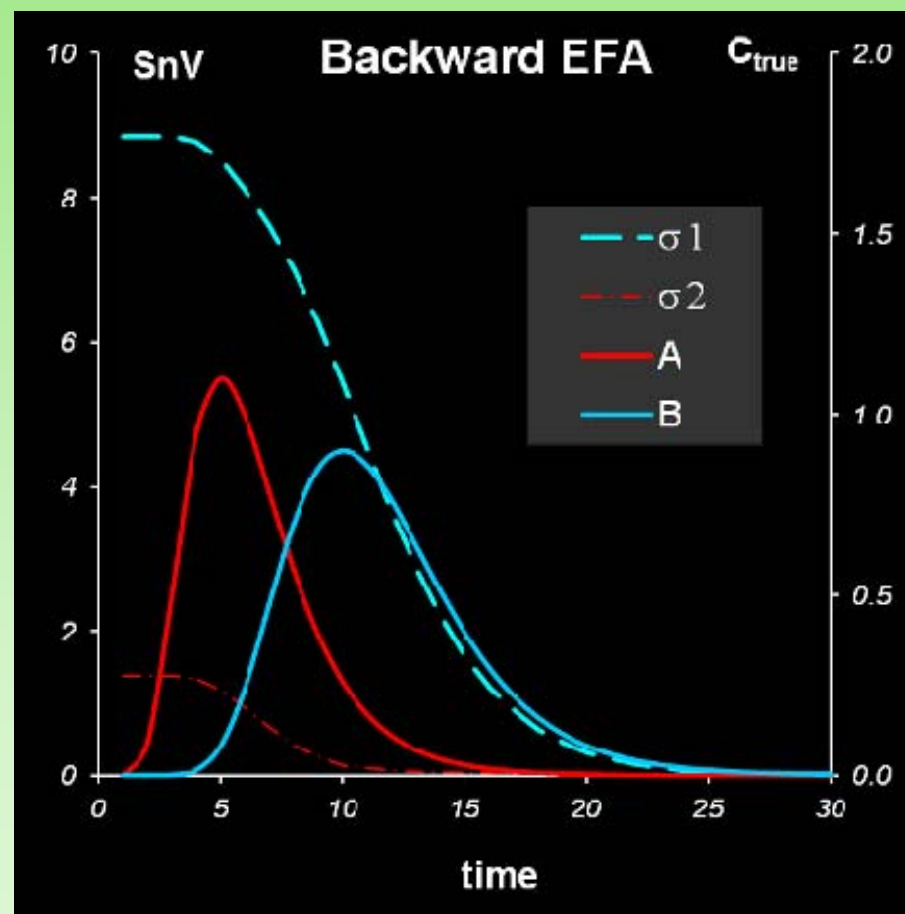


Изменение сингулярных значений

Прямой проход



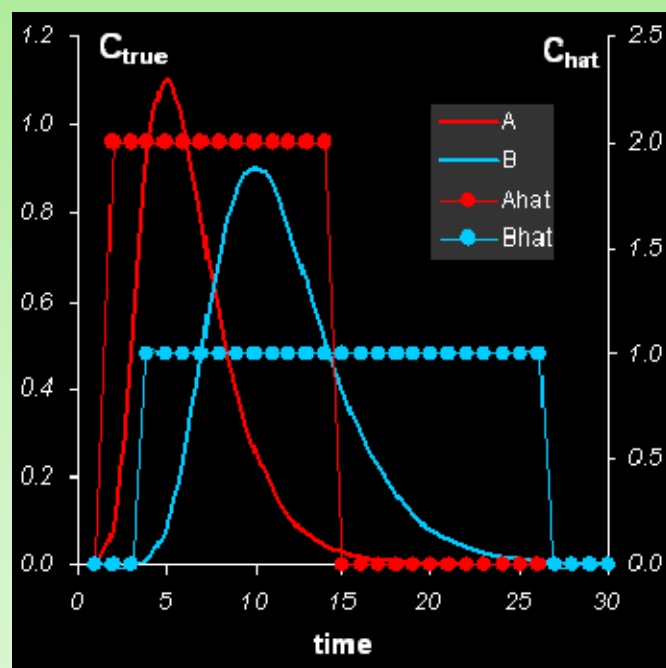
Обратный проход



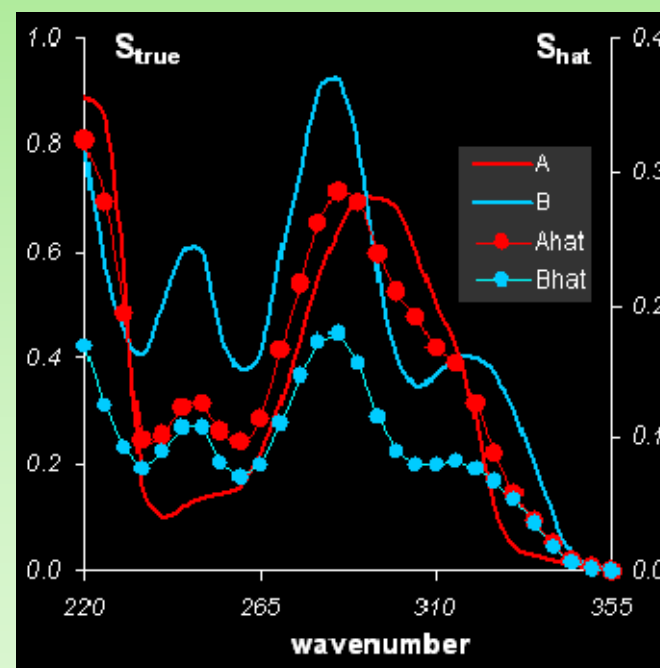
Определение концентрационных окон

$$W_a(t) = \begin{cases} 0, & \min(\sigma_a^F, \sigma_{A-a+1}^B) < \varepsilon \\ H_a, & \min(\sigma_a^F, \sigma_{A-a+1}^B) \geq \varepsilon \end{cases}$$

Профили элюции



Спектры чистых компонент



$$S_{hat} = X^t C (C^t C)^{-1}$$

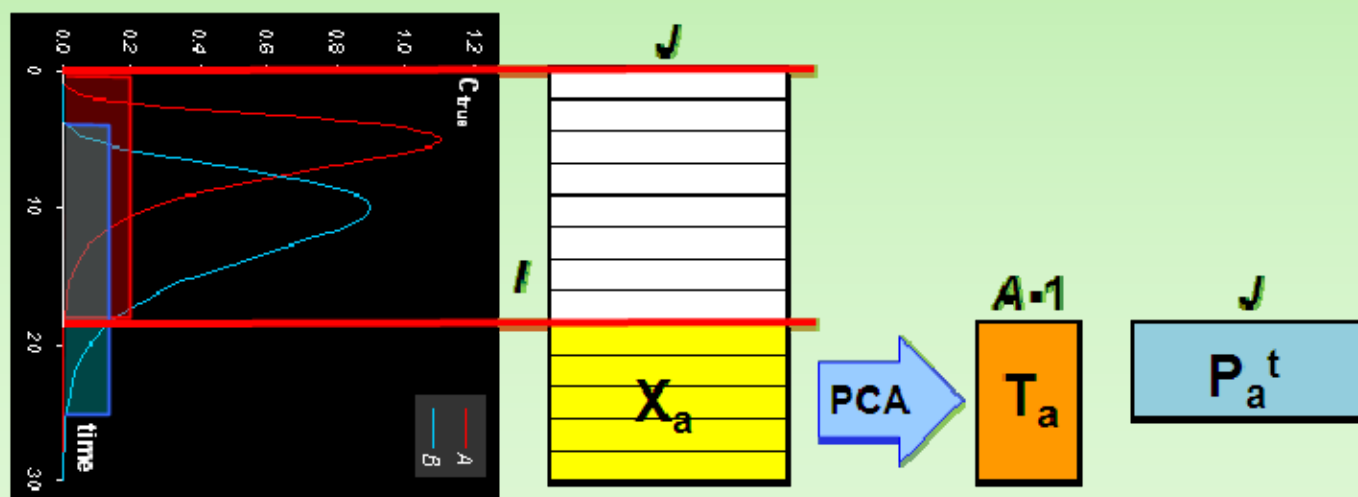
Оконный факторный анализ (WFA)

Идея *оконного факторного анализа* (Windows Factor Analysis, WFA) состоит в удалении из исходных данных X тех строчек, в которых концентрация каждого химического компонента отлична от нуля. Оставшуюся после удаления матрицу X_a разлагают с помощью PCA и определяют матрицу нагрузок P_a . Матрица P_a несет в себе информацию о спектрах всех химических компонентов, кроме исключенного. Поэтому для того, чтобы определить этот исключенный компонент, надо найти вектор ортогональный к P_a .



Edmund R.
Malinowski, 1992

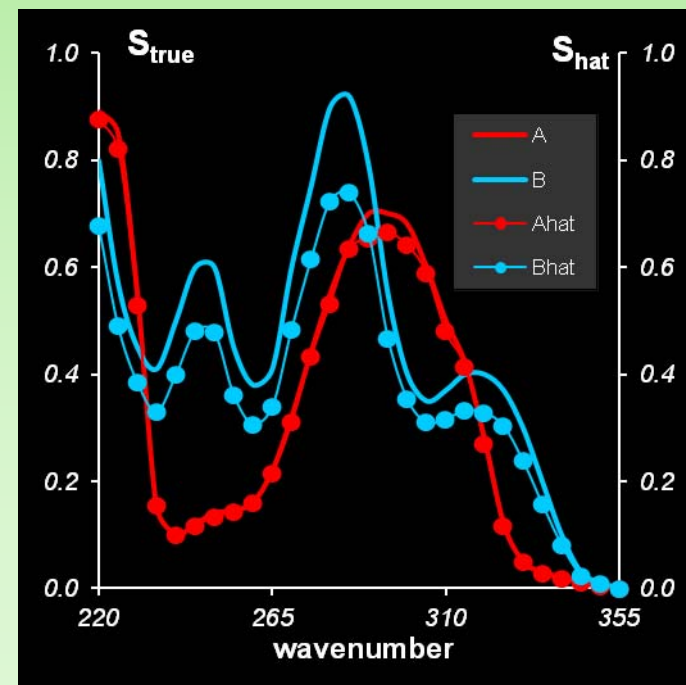
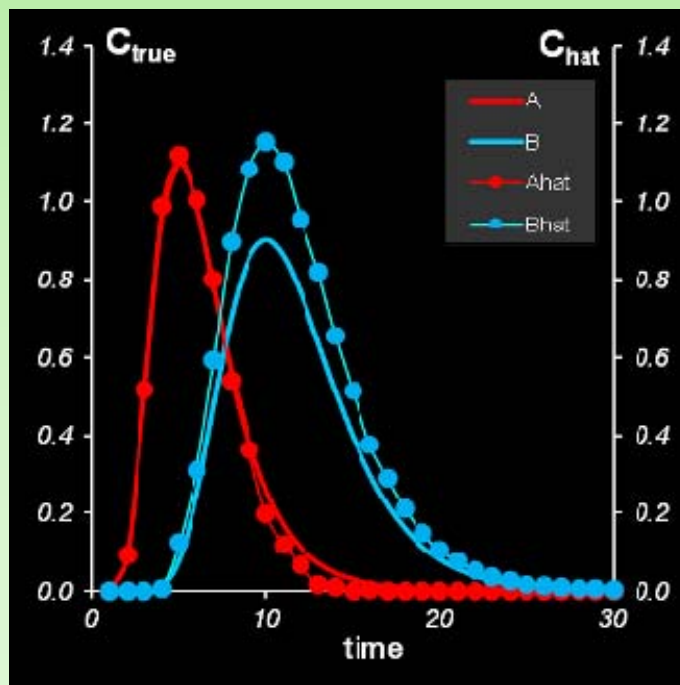
03.10.11



Алгоритм WFA

Для каждого химического компонента $a=1, \dots, A$:

1. Определяется матрица \mathbf{X}_a
2. Выполняется МГК: $\mathbf{X}_a = \mathbf{T}_a (\mathbf{P}_a)^t + \mathbf{E}_a$, и находится матрица \mathbf{P}_a
3. Вычисляется матрица $\mathbf{Z}_a = \mathbf{X} - \mathbf{X} \mathbf{P}_a (\mathbf{P}_a)^t$
4. Опять выполняется МГК: $\mathbf{Z}_a = \mathbf{t}_Z (\mathbf{p}_Z)^t + \mathbf{E}_Z$, и находится вектор счетов \mathbf{t}_Z
5. Все отрицательные элементы в \mathbf{t}_Z заменяются нулями. Это и есть \mathbf{c}_a



Чередующиеся наименьшие квадраты (ALS)

Метод чередующихся наименьших квадратов (Alternating Least-Squares, ALS) – это итерационный метод решения зада MCR. Вместо МГК он использует принцип наименьших квадратов, последовательно применяя на каждом шагу формулы

**По известному спектру S ,
находим концентрационный профиль C**

$$C_{\text{hat}} = XS(S^tS)^{-1}$$

**По известному концентрационному профилю C ,
находим спектр S**

$$S_{\text{hat}} = X^tC(C^tC)^{-1}$$



Romá Tauler, 1993

Алгоритм ALS

1. Методом PCA определяется число компонент, а методом EFA – концентрационные окна.
2. Задается начальное приближение для матрицы концентраций C_{in}

3. Матрица C_{in} подправляется т.ч. $C_{in} \geq 0$. Получается матрица C_{hat}

4. Находится оценка матрицы спектров S_{in}

$$S_{in} = X^t C_{hat} (C_{hat}^t C_{hat})^{-1}$$

5. Матрица S_{in} подправляется т.ч. $S_{in} \geq 0$. Получается матрица S_{hat}

6. Определяется оценка матрицы концентраций C_{out}

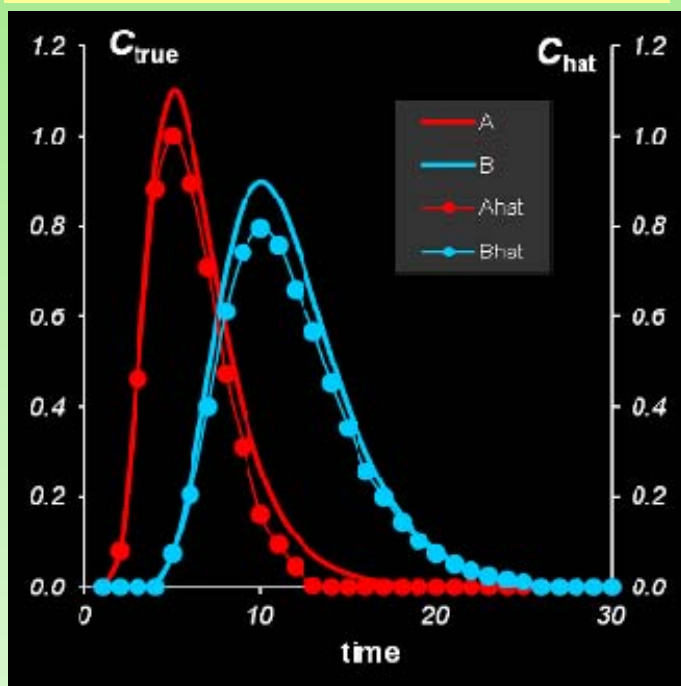
$$C_{out} = X S_{hat} (S_{hat}^t S_{hat})^{-1}$$

7. Матрица C_{in} заменяется матрицей C_{out}

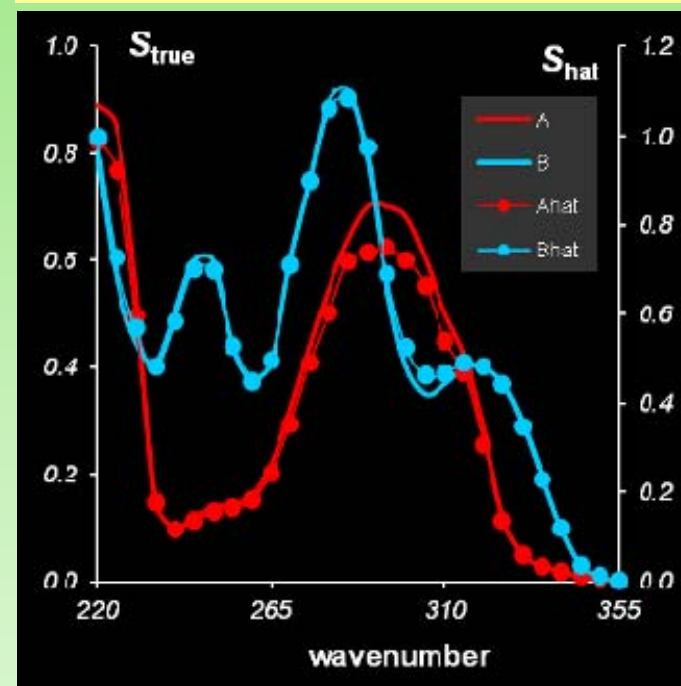
8. Шаги 3-7 повторяются до сходимости

Результат ALS

Профили элюции



Спектры чистых компонент



Дуальность MCR

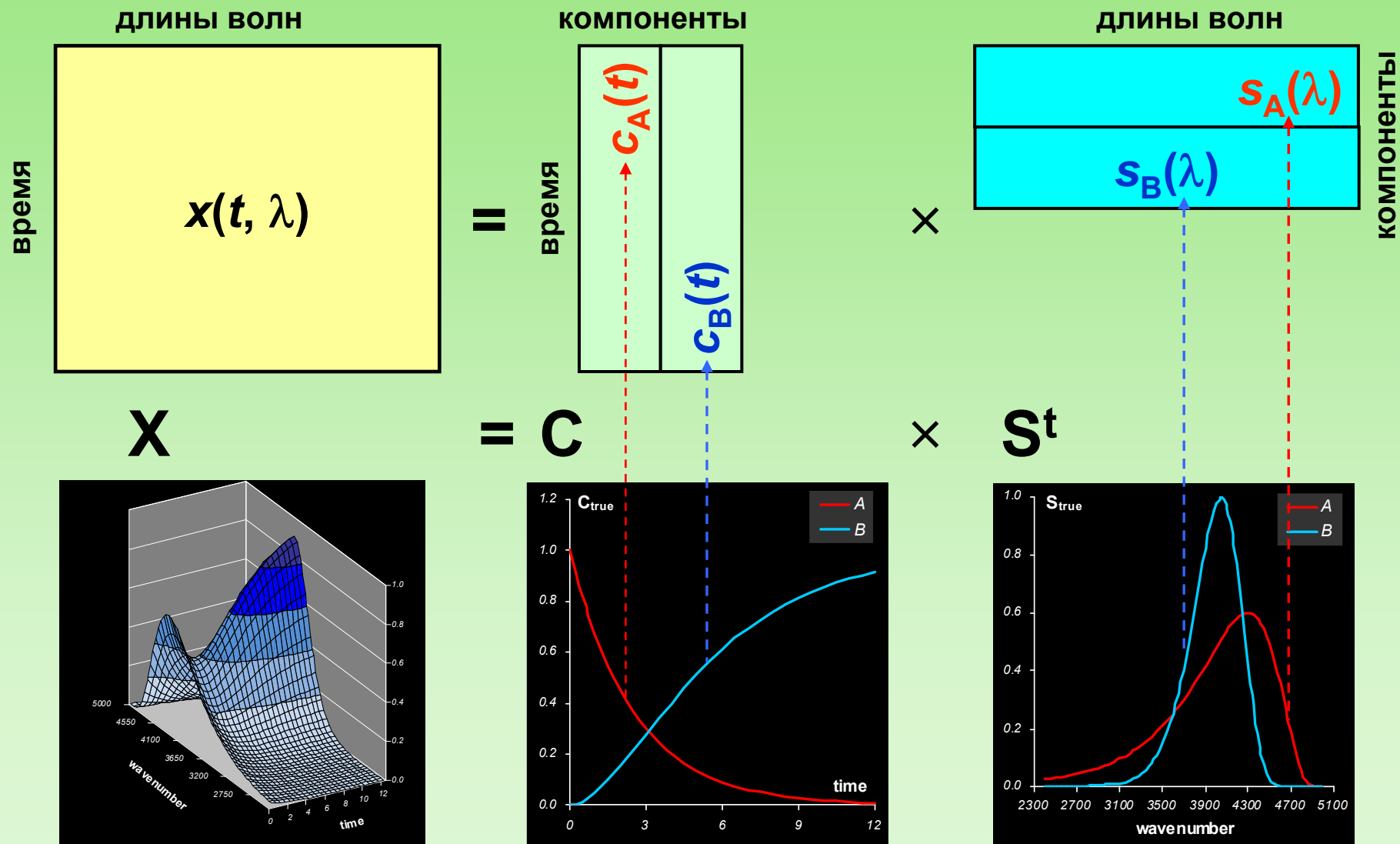
«Хроматографическая» и «кинетическая» задачи переходят друг в друга при транспонировании –

$$\mathbf{X} = \mathbf{CS}^t + \mathbf{E}$$

$$\mathbf{X}^t = \mathbf{SC}^t + \mathbf{E}^t$$

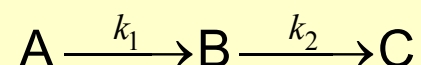
Однако, помимо формальной стороны дела есть и содержательная – априорное знание. Чем полнее мы его учитываем, тем точнее решение.

Кинетическая задача



Кинетическая схема

Предположим, что нам известна кинетика изменения концентраций в задаче MCR, например – это последовательная реакция первого порядка



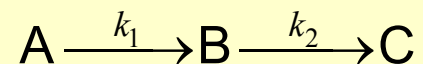
Такая кинетическая схема описывается системой дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= -k_1 A; & A(0) &= A_0 \\ \frac{dB}{dt} &= k_1 A - k_2 B; & B(0) &= 0 \\ \frac{dC}{dt} &= k_2 B; & C(0) &= 0 \end{aligned}$$

Постараемся учесть это априорное знание при решении задачи разрешения спектральных данных, снятых по ходу этого процесса.

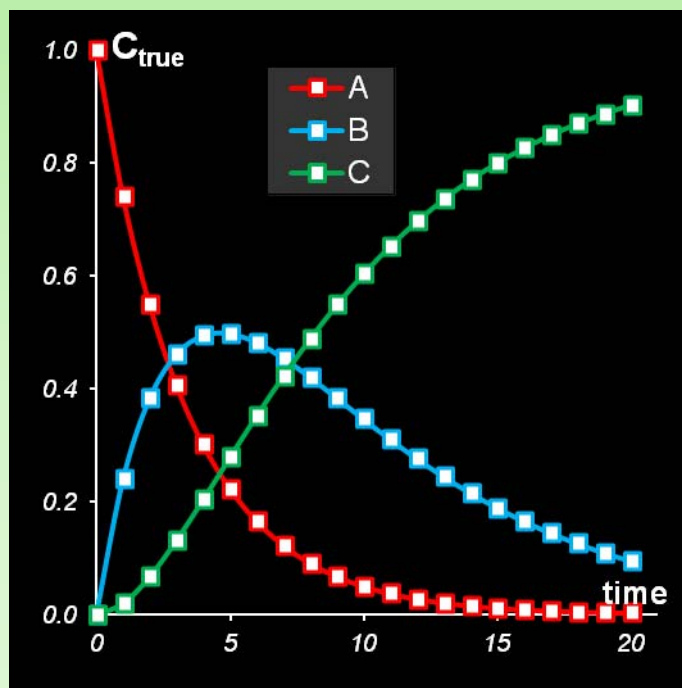
Модельные данные

Рассчитаем концентрации для нашей схемы

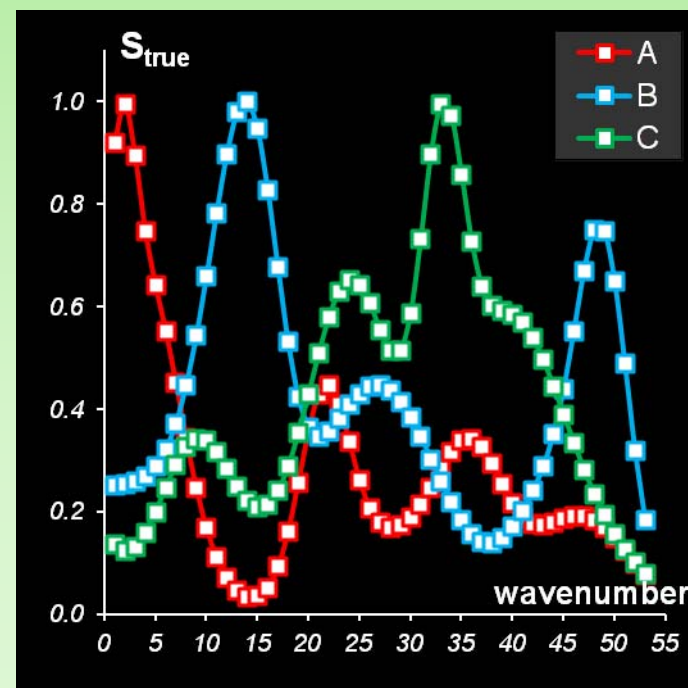


при $A_0=1$, $k_1=0.30$, $k_2=0.15$.

Кинетика

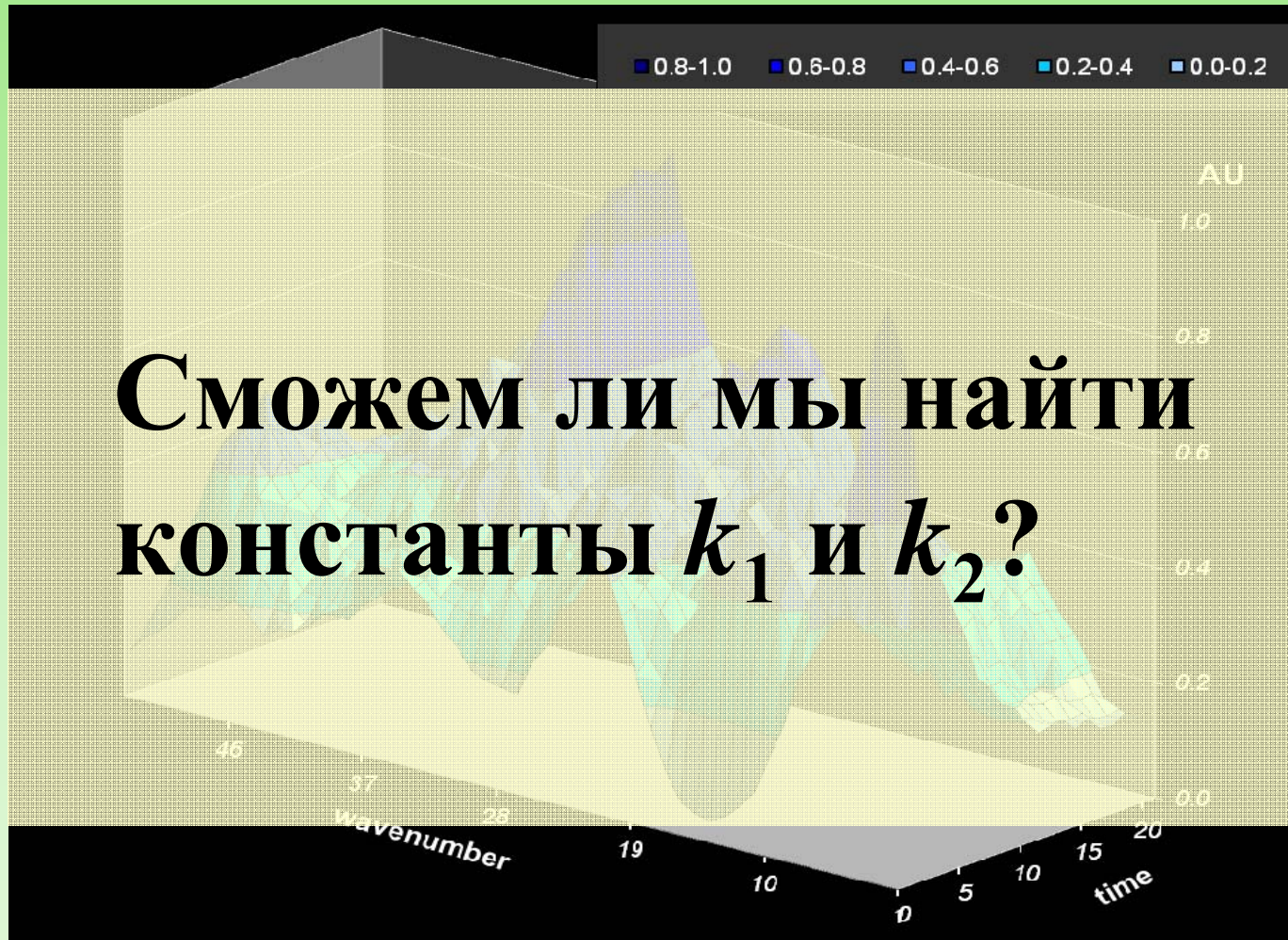


Спектры чистых компонент



Спектральные данные

$$X = CS^t + E$$

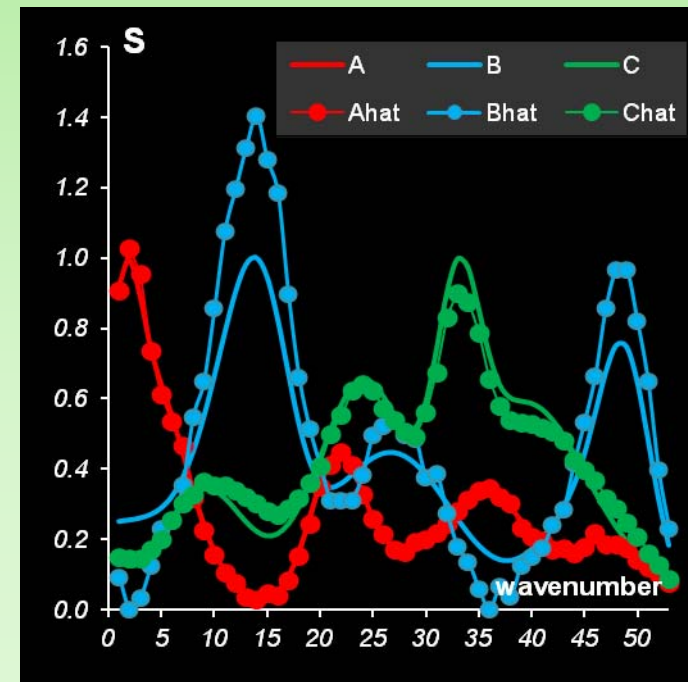
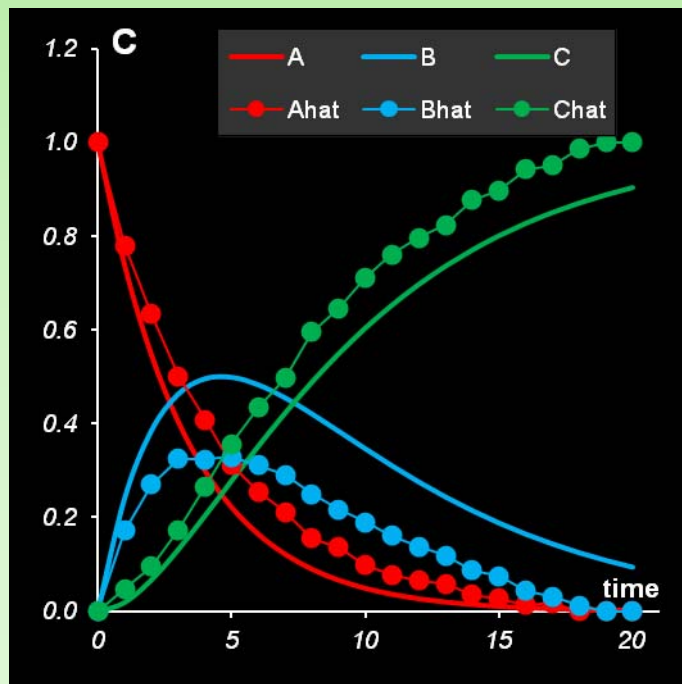


Формальное моделирование (Soft ALS)

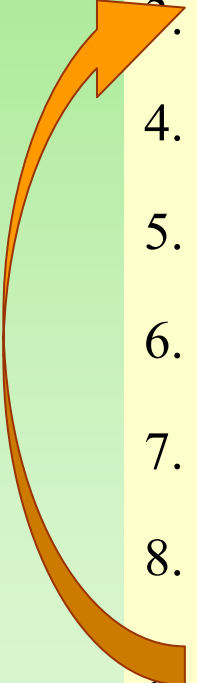
Для анализа данных X можно применить метод ALS с учетом:

1. Число компонент известно – их три: A , B , C ;
2. Спектры и концентрации неотрицательны причем $A(0)=1$, $B(0)=C(0)=0$
3. Система замкнута, т.е. в любой момент t :

$$A(t)+B(t)+C(t)=\text{Const}=1.$$

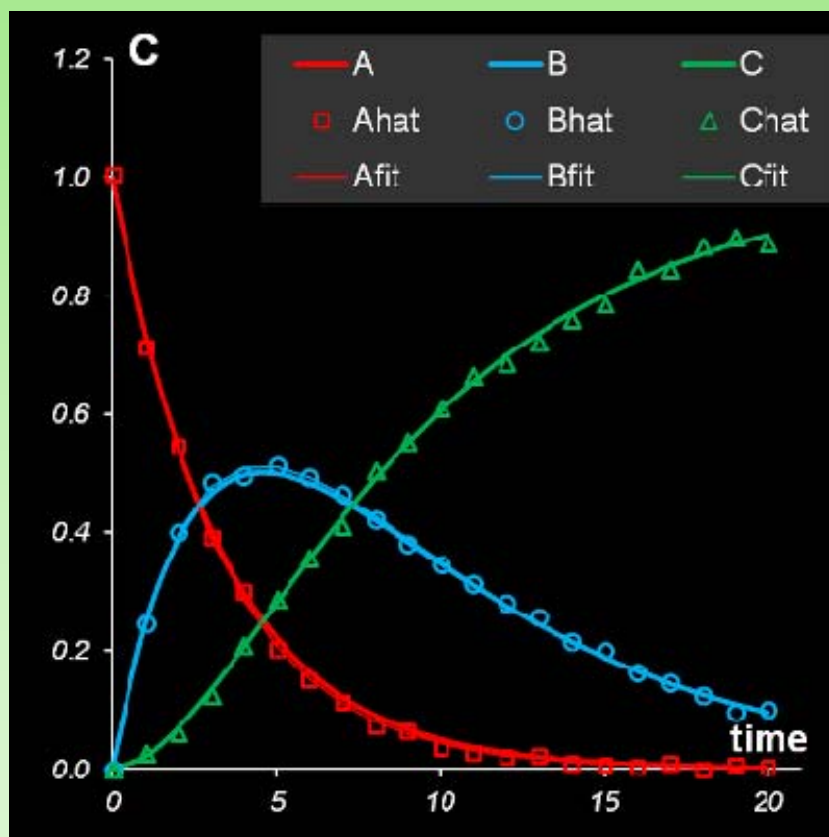


Содержательное моделирование (Hard ALS)

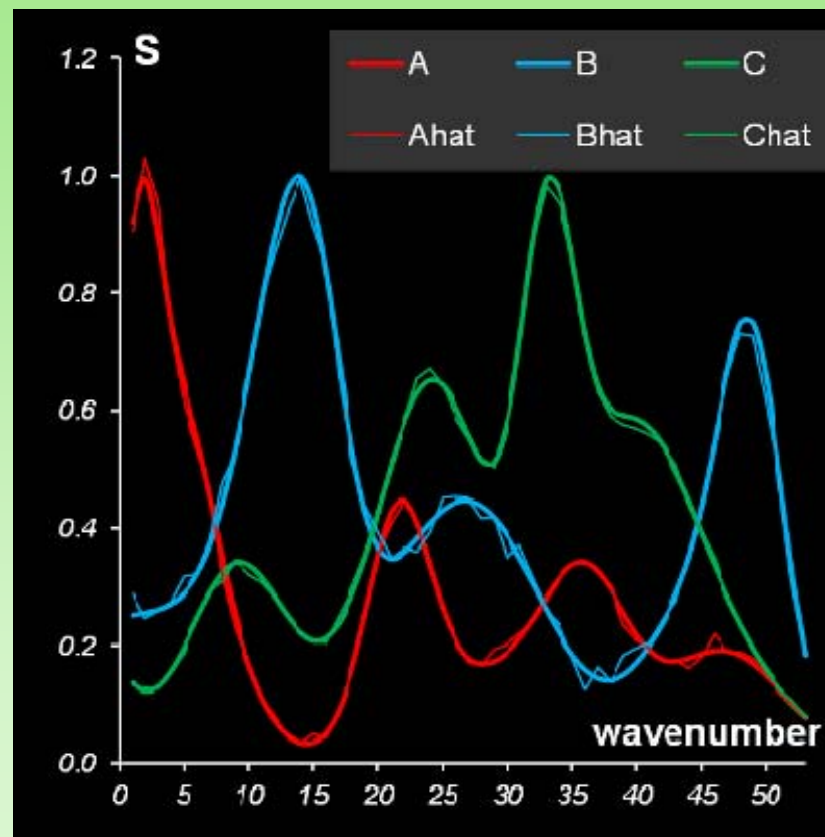
1. Задается начальное приближение для матрицы концентраций \mathbf{C}_{in}
 2. Задаются начальные значения кинетических параметров $\mathbf{k}=(k_1, \dots, k_p)$
 3. Матрица \mathbf{C}_{in} подправляется т.ч. $\mathbf{C}_{in} \geq 0$. Получается матрица \mathbf{C}_{hat}
 4. По кинетическим уравнениям вычисляется матрица $\mathbf{C}_{fit}(\mathbf{k})$
 5. Подбираются значения k_1, \dots, k_p для которых $\min (\|\mathbf{C}_{hat} - \mathbf{C}_{fit}(\mathbf{k})\|^2)$
 6. Находится оценка матрицы спектров: $\mathbf{S}_{in} = \mathbf{X}^t \mathbf{C}_{fit} (\mathbf{C}_{fit}^t \mathbf{C}_{fit})^{-1}$
 7. Матрица \mathbf{S}_{in} подправляется т.ч. $\mathbf{S}_{in} \geq 0$. Получается матрица \mathbf{S}_{hat}
 8. Находится оценка матрицы концентраций: $\mathbf{C}_{out} = \mathbf{X} \mathbf{S}_{hat} (\mathbf{S}_{hat}^t \mathbf{S}_{hat})^{-1}$
 9. Матрица \mathbf{C}_{in} заменяется матрицей \mathbf{C}_{out}
 10. Шаги 3-9 повторяются до сходимости.
- 

Результат Hard ALS

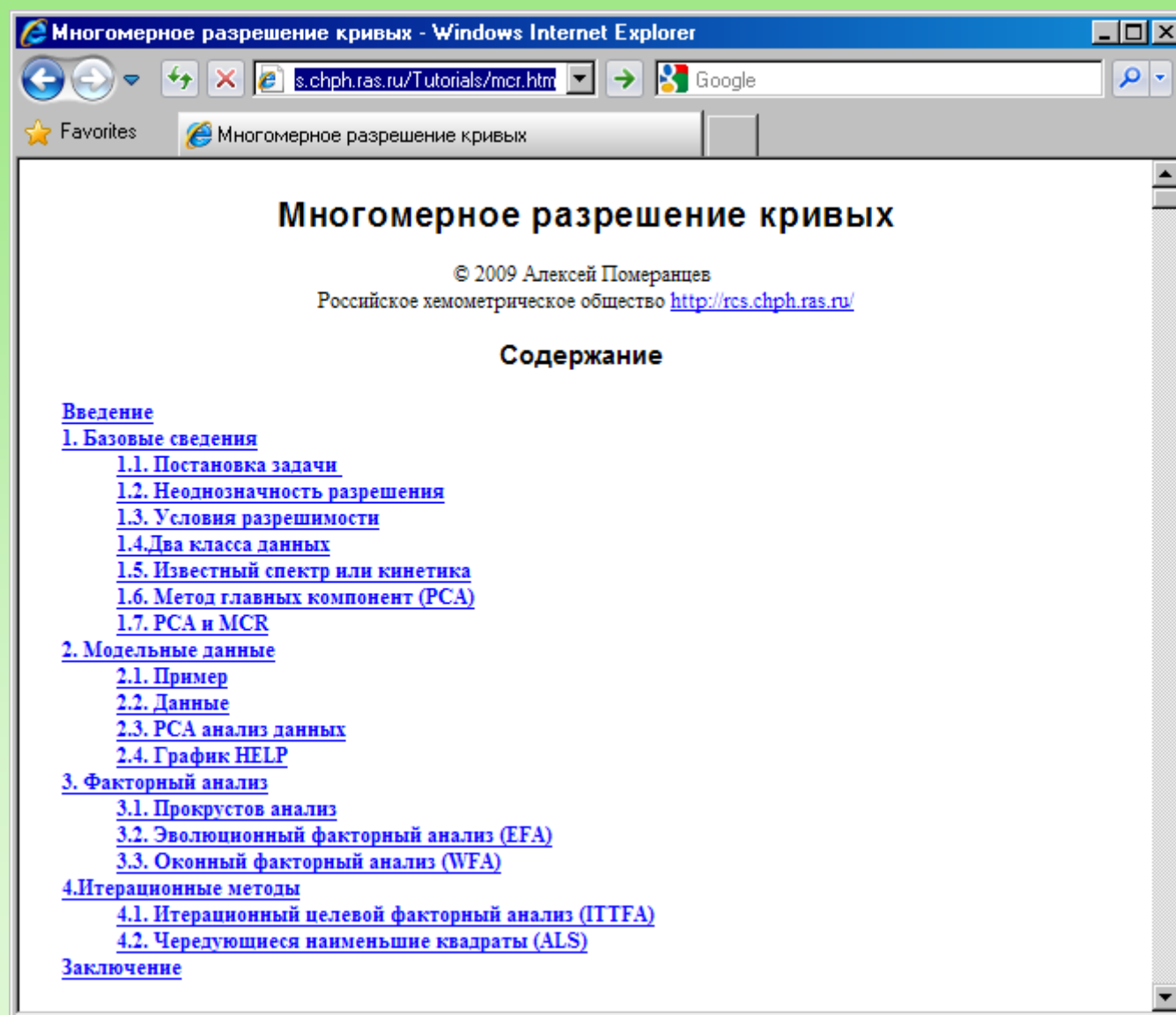
Кинетика



Спектры чистых компонент



<http://rcs.chph.ras.ru/Tutorials/mcr.htm>



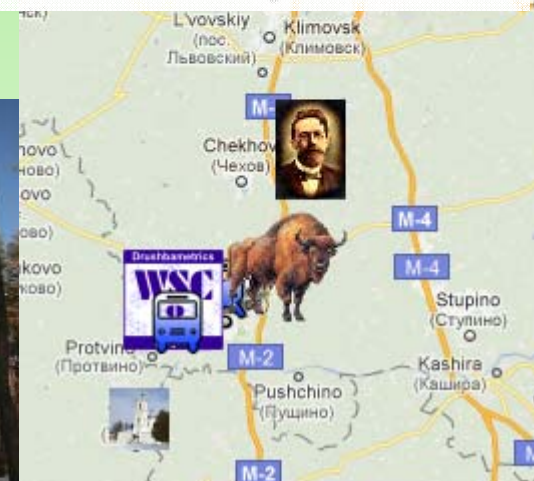
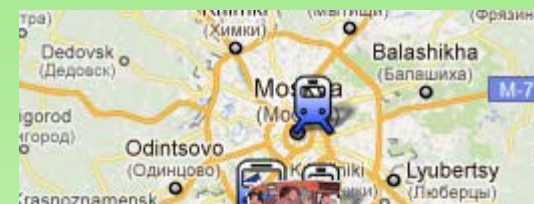
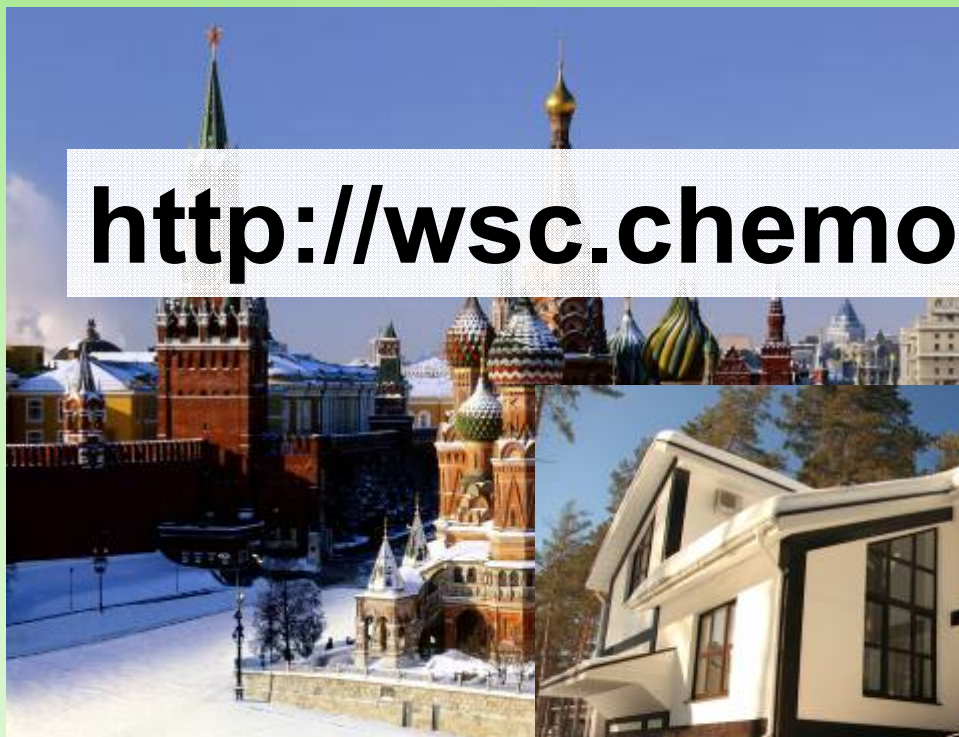
8th Winter Symposium on Chemometrics



Школа: 25.02-26.02.12, МГУ

Симпозиум: 27.02-02.03.12, Московская обл.

<http://wsc.chemometrics.ru/wsc8/>



**Спасибо за
внимание**



Ошибка адвоката