



## UNIVERSITÀ DI PISA

---

### CHEMIOMETRIA - MOD. A

**FABIO DI FRANCESCO**

Anno accademico 2018/19  
CdS CHIMICA  
Codice 176CC  
CFU 3

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
CHEMIOMETRIA	CHIM/01	LEZIONI	24	FABIO DI FRANCESCO

#### Obiettivi di apprendimento

##### *Conoscenze*

Il corso fornisce allo studente le nozioni basilari relative alla progettazione degli esperimenti ed all'analisi di dati multivariati.

##### *Modalità di verifica delle conoscenze*

Per l'accertamento delle conoscenze verrà svolto un colloquio individuale.

##### *Capacità*

Lo studente sarà in grado di progettare campagne di esperimenti ottimali volti allo studio e modellazione di sistemi complessi, e sarà in grado di analizzare dati multivariati.

##### *Modalità di verifica delle capacità*

Lo studente dovrà elaborare dati forniti dal docente, ricavando e validando modelli.

##### *Comportamenti*

Lo studente imparerà a gestire l'organizzazione di un lavoro in gruppo per la raccolta ed analisi di dati sperimentali.

##### *Modalità di verifica dei comportamenti*

Verranno svolte prove in itinere durante le lezioni frontali, sarà stimolata la discussione tra il docente e gli studenti.

##### *Prerequisiti (conoscenze iniziali)*

E' consigliato richiamare le nozioni di algebra lineare acquisite nel corso della laurea triennale, in particolare prodotto di matrici, determinanti, inversione di una matrice, risoluzione di un sistema di equazioni lineari. Questi argomenti saranno oggetto di ripasso nel corso delle lezioni. E' utile la conoscenza di elementi di statistica, media, deviazione standard, test t ed F, propagazione degli errori.

##### *Indicazioni metodologiche*

- lezioni frontali con ausilio di diapositive
- vengono fornite allo studente le diapositive, materiale di supporto e la registrazione audio delle lezioni per posta elettronica
- il docente è disponibile a ricevimento su richiesta

##### *Programma (contenuti dell'insegnamento)*

L'introduzione al disegno sperimentale prevede la definizione del concetto di modello, l'analisi della varianza ed un'illustrazione dei vantaggi della progettazione degli esperimenti in confronto all'approccio una variabile per volta. Viene definita la matrice di un modello, e viene mostrato come ricavare ed interpretare i coefficienti, illustrato il concetto di leverage e l'effetto della distribuzione dei punti sperimentali nel dominio sperimentale sull'incertezza di un modello. Vengono mostrati diversi disegni di screening (fattoriale completo, determinazione della significatività dei coefficienti, validazione del modello, fattoriale fratto, Plackett Burman) e metodi di ottimizzazione (metodo del semplice, disegni di Dohelert, disegni centrali composti, disegni D-Optimal) attraverso i quali ricavare le superfici di risposta. L'analisi esplorativa di dati multivariati è basata fondamentalmente sull'analisi delle componenti principali, ci segue una breve introduzione ai metodi di classificazione: analisi dei cluster, kNN, reti neurali.



## UNIVERSITÀ DI PISA

---

### Bibliografia e materiale didattico

Accascina, Villani, Algebra lineare, ETS;  
Chemometrics, R.G. Brereton, Wiley, (2003)  
Introduzione alla chemiometria, Todeschini, Edises (1998)

### Indicazioni per non frequentanti

Ai non frequentanti è consigliato richiedere al docente il materiale del corso e di contattarlo per ricevimenti.

### Modalità d'esame

L'esame è composto da una prova pratica da effettuare mediante computer e da un colloquio sui contenuti del corso.

*Ultimo aggiornamento 30/07/2018 13:39*