



# UNIVERSITÀ DI PISA

---

## CHEMIOMETRIA - MOD. A

**FRANCESCA MODUGNO**

Anno accademico 2020/21  
CdS CHIMICA  
Codice 176CC  
CFU 3

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
CHEMIOMETRIA - MOD. A	CHIM/01	LEZIONI	24	FRANCESCA MODUGNO

### Obiettivi di apprendimento

#### *Conoscenze*

Al termine del corso lo studente avrà acquisito conoscenza :

- dei metodi per la validazione e verifica di procedure analitiche, mediante statistica a singolo operatore ed esercizi interlaboratorio, e per la analisi della varianza (ANOVA).
- dei fondamenti della chemiometria applicata alla interpretazione dei dati chimici, e delle tecniche utili per l'elaborazione di dati chimici multivariati,
- dei fondamenti di tecniche di pattern analisi e di classificazione ed in particolare dell'analisi delle componenti principali e analisi dei cluster
- metodi di disegno sperimentale

#### *Modalità di verifica delle conoscenze*

L'accertamento delle conoscenze acquisite durante il corso sarà basato sulla discussione in aula di esempi di problematiche analitiche relative a quanto spiegato nelle lezioni, nonché mediante lo svolgimento di esercizi in classe, le cui soluzioni saranno discusse in gruppi e con il docente.

#### *Capacità*

Abilità che verranno acquisite durante il corso:

- Determinare e utilizzare i parametri per la messa a punto, verifica e validazione di una procedura analitica
- Gestire e interpretare di dati multivariati e utilizzare software per la analisi multivariata dei dati
- Utilizzare le principali tecniche di disegno sperimentale per pianificare gli esperimenti da effettuare per la messa a punto di una procedura analitica

#### *Modalità di verifica delle capacità*

L'accertamento delle capacità acquisite durante il corso sarà basato sulla discussione in aula di esempi di problematiche analitiche relative a quanto spiegato nelle lezioni, nonché mediante lo svolgimento di esercizi.

#### *Comportamenti*

Durante il corso gli studenti saranno portati ad acquisire un atteggiamento critico e rigoroso nei confronti della descrizione, selezione e messa a punto delle procedure analitiche, e saranno incoraggiati ad esprimersi con un linguaggio scientifico corretto ed accurato nella discussione e nella descrizione di procedure, metodologie e risultati.

La discussione delle problematiche presentate con i compagni e con il docente sarà spunto per l'acquisizione di un atteggiamento costruttivo nel problem solving di gruppo.

#### *Modalità di verifica dei comportamenti*

Durante le discussioni e le esercitazioni in gruppo saranno verificate le capacità degli studenti di esprimersi con un linguaggio rigoroso e preciso e di collaborare costruttivamente con gli altri.

### Prerequisiti (conoscenze iniziali)



## UNIVERSITÀ DI PISA

Sono requisiti essenziali le conoscenze e le capacità acquisite nei corsi di Chimica Analitica e di Matematica del corso di laurea triennale in chimica o in chimica Industriale.

### Corequisiti

Conoscenze di matematica, geometria, statistica di base ed algebra lineare. Capacità di utilizzare il foglio di calcolo Excel.

### Indicazioni metodologiche

Il corso si svolgerà mediante lezioni frontali prevalentemente in italiano con ausilio di slide in inglese.

Si utilizzeranno per le esercitazioni i PC dell'aula informatica e software di analisi dei dati.

Gli studenti svolgeranno esercizi sia da soli che in gruppo.

Verranno fornite dispense e materiale didattico.

Il sito di e-learning del corso sarà utilizzato costantemente per condividere con gli studenti il materiale didattico e il file di dati utilizzati nelle esercitazioni, nonché per le comunicazioni docente-studenti e per la condivisione del materiale bibliografico.

Potranno essere organizzati seminari da parte di docenti esterni, e gli studenti potranno essere incoraggiati a partecipare a seminari esterni al corso.

### Programma (contenuti dell'insegnamento)

#### Modulo A

Metodi per la validazione e verifica di procedure analitiche, mediante statistica a singolo operatore ed esercizi interlaboratorio. Analisi della varianza (ANOVA).

Fondamenti delle tecniche utili per l'elaborazione di dati chimici multivariati, introduzione alla gestione dei dati reali e avvio all'utilizzazione del software specifico.

Introduzione alla chemiometria: la chemiometria nel contesto scientifico, l'analisi di un "problema complesso".

La struttura multidimensionale dei dati: campioni e variabili, il pretrattamento dei dati, i dati mancanti, le trasformazioni delle variabili, la scalatura dei dati.

Richiami di algebra matriciale, matrici varianza-covarianza, matrici di correlazione, distanza e similarità nello spazio multidimensionale. Trasformazioni lineari.

Metodi di pattern analysis:

Analisi delle componenti principali (PCA): *loadings* e *scores* in PCA, la correlazione nei dati, il numero di componenti significative.

Interpretazione dei risultati, esempi pratici.

Analisi dei *cluster*: matrice delle distanze e matrice delle similarità, esempi di metodi gerarchici e non gerarchici per l'analisi dei *cluster*.

Interpretazione dei risultati, esempi pratici.

Metodi di classificazione:

esempi di metodi di classificazione, matrice di confusione, parametri di valutazione dei modelli di classificazione.

Metodi di regressione: il metodo dei minimi quadrati ordinari, parametri di valutazione dei modelli di regressione, il metodo *partial least squares regression*.

#### Modulo B

Disegno sperimentale

### Bibliografia e materiale didattico

Matthias Otto, *Chemometrics: Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry* © 2017 Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, ISBN: 9783527699377

Richard G. Brereton, *Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant*, 2003 John Wiley & Sons, Ltd, ISBN: 9780471489771 - *Fundamental Reviews of Chemometrics, Analytical Chemistry, April issues of even-numbered years (before 1980 "Fundamental Reviews of Statistical and Mathematical Methods in Analytical Chemistry")*

*Journal of Chemometrics* <http://www3.interscience.wiley.com/cgi-bin/jhome/4425>

*Journal of Chemometrica and Intelligent Laboratory Systems* <http://www.sciencedirect.com/science/journal/01697439>

### Modalità d'esame

L'esame è costituito da una prova orale o un esercizio rappresentata da un colloquio tra il candidato e i docenti e collaboratori del docente o altri docenti facenti parte della commissione. Argomento del colloquio saranno tutti gli argomenti del corso.

La prova non è superata se il candidato mostra di non essere in grado di esprimersi in modo chiaro e di usare la terminologia corretta, oppure se il candidato non risponde correttamente alle domande. Il colloquio non avrà esito positivo se il candidato mostrerà l'incapacità di mettere in relazione parti del programma e nozioni acquisite nei precedenti corsi di chimica analitica.

### Pagina web del corso

<https://polo3.elearning.unipi.it/>



## UNIVERSITÀ DI PISA

---

### Note

Il corso 2020-2021 si terrà al secondo semestre.

*Ultimo aggiornamento 01/12/2020 12:14*