



UNIVERSITÀ DI PISA

CHEMIOMETRIA - MOD. B

FABIO DI FRANCESCO

Anno accademico	2020/21
CdS	CHIMICA
Codice	359CC
CFU	3

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
CHEMIOMETRIA - MOD. B	CHIM/01	LEZIONI	0	FABIO DI FRANCESCO

Obiettivi di apprendimento

Conoscenze

Il corso fornisce allo studente le nozioni basilari relative alla progettazione degli esperimenti.

Modalità di verifica delle conoscenze

Per l'accertamento delle conoscenze verrà svolto un esame scritto.

Capacità

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

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 sperimentale per la raccolta ed analisi di dati.

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
- agli studenti è dato accesso ad uno spazio digitale condiviso contenente diapositive, materiale di supporto e registrazioni video delle lezioni
- il docente è disponibile a ricevimento su richiesta (via email)

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.

Bibliografia e materiale didattico



UNIVERSITÀ DI PISA

Accascina, Villani, Algebra lineare, ETS;
Chemometrics, R.G. Brereton, Wiley, (2003)
Myers, Generalized linear models, Wiley, (2010)

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 eventuale colloquio sui contenuti del corso.

Note

Nell'anno accademico 20/21 il corso sarà tenuto al secondo semestre.

Ultimo aggiornamento 16/12/2020 12:40