



UNIVERSITÀ DI PISA

CHEMIOMETRIA

FRANCESCA MODUGNO

Anno accademico	2021/22
CdS	CHIMICA
Codice	353CC
CFU	6

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
CHEMIOMETRIA	CHIM/01, CHIM/01	LEZIONI	48	FABIO DI FRANCESCO 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
- nozioni basilari relative alla progettazione degli esperimenti

Modalità di verifica delle conoscenze

L'accertamento delle conoscenze acquisite sarà basato sulla discussione di esempi di problematiche chimiche, sullo svolgimento di esercizi in classe, le cui soluzioni saranno discusse in gruppi e con i docenti.

Capacità

Abilità che verranno acquisite durante il corso:

- Determinare e utilizzare i parametri per la messa a punto, verifica e validazione di procedure in ambito chimico
- Gestire e interpretare di dati multivariati e utilizzare software per la analisi multivariata dei dati
- Progettare campagne di esperimenti ottimali volti allo studio e modellazione di sistemi complessi.

Modalità di verifica delle capacità

L'accertamento delle capacità acquisite durante il corso sarà basato sulla discussione in aula di esempi di problematiche relative a quanto spiegato nelle lezioni, nonché mediante lo svolgimento di esercizi nei quali lo studente dovrà elaborare dati forniti dai docenti, ricavando e validando modelli.

Comportamenti

Durante il corso gli studenti saranno portati ad acquisire un atteggiamento critico e rigoroso nei confronti della descrizione di procedure chimiche, della loro messa a punto e dell'analisi dei risultati ottenuti, ed incoraggiati ad esprimersi a riguardo con un linguaggio scientifico corretto ed accurato. La discussione delle problematiche presentate con i compagni ed i docenti 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)

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. In particolare, è consigliato richiamare nozioni di algebra lineare quali prodotto di matrici, determinanti,



UNIVERSITÀ DI PISA

inversione di una matrice, risoluzione di un sistema di equazioni lineari. E' utile la conoscenza di elementi di statistica, media, deviazione standard, test t ed F, propagazione degli errori.

Indicazioni metodologiche

Il corso si svolgerà mediante lezioni frontali e su piattaforma Teams con ausilio di diapositive. Per le esercitazioni gli studenti dovranno usare un proprio PC e software per analisi di dati, svolgendo esercizi sia da soli che in gruppo. Verranno fornite dispense e materiale didattico. Il sito di e-learning del corso ed uno spazio drive condiviso saranno utilizzati 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 (Prof. Francesca Modugno)

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 analisi:

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 (Prof. Fabio Di Francesco)

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

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>

Chemometrics, R.G. Brereton, Wiley, (2003)

Myers, Generalized linear models, Wiley, (2010)

Indicazioni per non frequentanti

Ai non frequentanti è consigliato richiedere ai docenti il materiale del corso e di contattarli 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.

La prova è superata se il candidato ottiene un punteggio sufficiente alla prova scritta e si esprime in modo chiaro usando una terminologia appropriata, rispondendo correttamente alle domande sugli argomenti fondamentali.



UNIVERSITÀ DI PISA

Note

Il corso 2021-2022 si terrà al secondo semestre.

Ultimo aggiornamento 28/07/2021 13:24