



UNIVERSITÀ DI PISA

CHEMIOMETRIA - MOD. A

FABIO DI FRANCESCO

Academic year	2017/18
Course	CHIMICA
Code	176CC
Credits	3

Modules	Area	Type	Hours	Teacher(s)
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.

Prerequisiti per studi successivi

Gli argomenti per corso possono essere utili per l'attività di tesi.

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, Placket Burman) e metodi di ottimizzazione (metodo del simplesso, disegni di Dohelert,



UNIVERSITÀ DI PISA

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.

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.

Stage e tirocini

Non previsti.

Ultimo aggiornamento 17/01/2018 10:59