PARTE A CURA DELLA U.O. DIDATTICA E SERVIZI AGLI STUDENTI

Principali informazioni sull'insegnamento	
Denominazione insegnamento	Chemiometria
Corso di studio	Scienze Chimiche
Classe di laurea	LM-54
Crediti formativi (CFU)	6
Obbligo di frequenza	Si
Lingua di erogazione	italiano
Anno Accademico	2018/2019

Docente responsabile	
Nome e Cognome	Francesco Palmisano
indirizzo mail	francesco.palmisano@uniba.it
telefono	080-5442016

Dettaglio insegnamento	Ambito disciplinare	SSD	tipologia attività
		CHIM/01	attività formative in uno o più ambiti disciplinari caratterizzanti la classe

Erogazione insegnamento	Anno di corso	Semestre
	1	1

Modalità erogazione	CFU lez	Ore lez	CFU lab	Ore lab	CFU eserc	Ore eserc	CFU eserc campo	Ore eserc campo
	4	32	0	0	2	30	0	0

Organizzazione della didattica	ore totali	ore insegnamento	ore studio individuale
	150	62	88

Calendario	Inizio attività didattiche	Fine attività didattiche

PARTE A CURA DEL DOCENTE

Syllabus	
Prerequisiti	Nozioni elementari di statistica descrittiva acquisiti nella laurea triennale
Risultati di apprendimento attesi *(declinare rispetto ai Descrittori di Dublino) (si raccomanda che siano coerenti con i risultati di apprendimento del CdS, riportati nei quadri A4a, A4b e A4c della SUA, compreso i risultati di apprendimento trasversali)*	
Conoscenza e capacità di comprensione	Conoscenza dei fondamenti teorici dei principali metodi chemiometrici utilizzati in ambito scientifico.
Capacità di applicare conoscenza e comprensione	Capacità di utilizzare i metodi chemiometrici più appropriati per • progettare, selezionare ed ottimizzare procedure ed esperimenti; • estrarre la massima informazione possibile sul sistema in esame attraverso l'analisi e l'interpretazione dei dati.
Autonomia di giudizio	Capacità di affrontare su base chemiometrica l'analisi di un problema complesso.

Abilità comunicative	capacità di sostenere un contraddittorio su una problematica che comporta l'uso di metodi chemiometrici;
Capacità di apprendimento	capacità di trasferire le conoscenze di base acquisite a nuove problematiche applicative anche a carattere interdisciplinare

Contenuti dell'insegnamento	Rappresentazioni grafiche di distribuzioni univariate; le misure di tendenza centrale e di dispersione; Indici di forma: simmetria e curtosi. Variabili random continue; funzione densità di probabilità; funzione di ripartizione; funzione generatrice dei momenti; momenti di una distribuzione; distribuzione continua uniforme; distribuzione normale; distribuzione chi-quadro; distribuzione t di Student; distribuzione F. Distribuzioni campionarie; stimatori biased e unbiased; Inferenza statistica. Intervalli di confidenza. Test di ipotesi (una e due code); errori di primo e secondo tipo; potenza del test; stima post test; test sulla singola media; test sulle medie estratte da due campioni; paired t-test; test per l'identificazione di outliers; two one-sided t-test (TOST) per l'equivalenza; test sulla singola varianza; test su due varianze; confronto di più varianze (Hartley's F-max test; test di Bartlett; Levene's S test); stabilizzazione della varianza. Analisi della varianza: One-way ANOVA (fixed- and random-effects models); Confronti multipli a posteriori (post hoc test): Fisher Least significant difference, Tukey, Tukey-Kramer, Bonferroni, Duncan's multiple range test, Dunnett) Tecniche di randomizzazione e blocking. Two-way ANOVA con e senza interazione; ANOVA multifattoriale. Disegno sperimentale ed ottimizzazione. Disegni di screening: disegno fattoriale completo e frazionato; disegno Plackett-Burman; disegni della superficie di risposta: disegno composito centrale, disegno Box-Behnken; disegno miscela. Steepest ascent (descent); Box-type EVOP; simplesso a passo fisso e variabile. Metodi multivariati. La struttura multivariata dei dati; pretrattamento dei dati; trasformazioni delle variabili; scalatura dei dati. Metodi non supervisionati: analisi delle componenti principali; analisi dei cluster: misure di distanze, metodi gerarchici e non-gerarchici. Metodi supervisionati: analisi discriminante lineare; k-nearest neighbour method. Regressione. Regressione lineare pesata e non pesata; parametri del modello; il metodo dei minimi quadrati ordinari; parametri di valutazione dei modelli; metodi diagnostici per la regressione. Regressione non lineare. Regressione lineare multipla; analisi multicomponente. Rivelazione di un segnale analitico in presenza di noise gaussiano; limite di rivelabilità, limite di quantificazione.
Testi di riferimento	R. Todeschini "Introduzione alla chemiometria" EdiSES – Napoli D.L. Massart et al. "Handbook of chemometrics and qualimetrics" Elsevier Science J.N. Miller, J.C. Miller, "Statistics and chemometrics for analytical chemistry" PEARSON Prentice Hall M. Forina "Fondamenta di Chimica Analitica" – e-book ISBN 9788890406461 D.C. Montgomery "Design and analysis of experiments (5th Ed.)" John Wiley & Sons, Inc.
Note ai testi di riferimento	-
Metodi didattici	Lezioni frontali; esercitazioni numeriche anche con l'ausilio di pacchetti softwares dedicati;
Metodi di valutazione *(indicare almeno la tipologia scritto, orale, altro)*	Colloquio orale
Criteri di valutazione *(per ogni risultato di apprendimento atteso su indicato, descrivere cosa ci si aspetta lo studente conosca o sia in grado di fare e a*	Lo studente deve dimostrare: -piena padronanza nell'affrontare problemi di inferenza statistica; -piena conoscenza delle principali tecniche di statistica multivariata; -piena conoscenza dei principi di base delle tecniche di disegno sperimentale e ottimizzazione;

quale livello al fine di dimostrare che un risultato di apprendimento è stato raggiunto e a quale livello)	-capacità di pianificare ed eseguire esperimenti mirati all'analisi di un problema complesso al fine di estrarre l'informazione utile mediante appropriate tecniche di esplorazione ed elaborazione dei dati.
Altro	