

## SYLLABUS DEL CORSO

### Metodi Analitici per la Chimica delle Formulazioni

2021-2-F5401Q060

---

#### Obiettivi

Obiettivo principale dell'insegnamento è fornire allo studente i fondamenti teorici e gli strumenti operativi delle principali strategie analitiche per l'ottimizzazione razionale di formulazioni e per il trattamento adeguato dell'informazione contenuta nei dati chimici sperimentali, così da consentire lo sviluppo di un approccio science-based che focalizzi il meccanismo di azione di ciascun componente che contribuisce al raggiungimento delle funzionalità richieste della formulazione. La conoscenza dei principi e delle condizioni operative delle principali tecniche nell'ambito del disegno sperimentale per le formulazioni e le miscele verrà sviluppata insieme alla capacità di scegliere e di gestire gli approcci di indagine più adatti alle finalità dell'analisi. Lo studente saprà quindi valutare le caratteristiche degli approcci fondamentali, i campi di applicazione, di individuarne i vantaggi e gli svantaggi e sarà quindi in grado di suggerire la scelta della soluzione ritenuta più idonea per uno specifico problema.

In particolare, al termine del corso, lo studente dovrà dimostrare di aver raggiunto i seguenti obiettivi formativi:

#### Conoscenza e capacità di comprensione:

- o descrivere le principali strategie analitiche per le formulazioni presentati nel corso
- o descrivere i parametri fondamentali per la valutazione dei risultati
- o descrivere vantaggi e svantaggi dei diversi approcci studiati

#### Capacità di applicare conoscenza e comprensione

- o selezionare la strategia più adatta ad affrontare un problema specifico
- o prevedere quale tipo di informazione sarà possibile enucleare dai dati in esame

- o valutare la possibilità di utilizzare strategie alternative per la soluzione del problema

### **Autonomia di giudizio**

- o acquisire le conoscenze e competenze in grado di sviluppare una capacità di comprensione critica dei principali metodi di disegno sperimentale applicato all'ambito delle formulazioni
- o selezionare gli approcci ed i parametri utili ad estrarre specifiche informazioni dai dati in esame
- o redigere e giustificare una discussione critica sui metodi utilizzati e sui risultati ottenuti

### **Capacità di apprendimento**

- o comprendere le diverse tecniche studiate e la loro collocazione metodologica al fine di un impiego corretto e mirato al problema da risolvere

### **Contenuti sintetici**

Introduzione al disegno sperimentale. Disegni sperimentali per lo screening dei fattori. I modelli di regressione per il disegno sperimentale. Disegno sperimentali per l'ottimizzazione. Dominio sperimentale per le miscele. Disegni sperimentali e modelli per lo studio di formulazioni. Esperienze pratiche in laboratorio per acquisire gli strumenti e le modalità di analisi.

### **Programma esteso**

Introduzione al disegno sperimentali per le formulazioni. Introduzione al disegno sperimentale: terminologia e metodologia della ricerca sperimentale: analisi del problema, pianificazione degli esperimenti, esecuzione degli esperimenti, analisi dei dati e modellazione. Disegni fattoriali completi per lo screening: codifica dei fattori, piano sperimentale e matrice sperimentale, calcolo degli effetti e loro varianza, calcolo dei coefficienti con la regola dei segni. Disegni fattoriali frazionari: effetti confusi e risoluzione. Disegni di Plackett-Burman e utilizzo di fattori dummy. Modelli di regressione per il disegno sperimentale, stima dei coefficienti, matrici di informazione e dispersione, varianza dei residui come stima della varianza sperimentale, gradi di libertà nel disegno sperimentale. Diagnostica del modello di regressione: ANOVA e lack of fit, residui, normal probability plot, precisione delle predizioni, intervalli di confidenza per i coefficienti, convalida attraverso punti di prova. Metodi di ottimizzazione: il metodo di path ascent e metodo simplex, disegni fattoriali completi a tre livelli, i disegni compositi centrali, i disegni di Dohelert, i disegni di Box-Behnken, i disegni D-ottimali. Superfici di risposta. Modellazione a risposta multipla: desiderabilità e fronte di Pareto. Esempi di applicazioni del disegno sperimentale per fattori indipendenti.

Disegni sperimentali per le formulazioni. Dominio sperimentale per miscele e simplex, plot ternari per miscele. Metodi di regressione per i disegni sperimentali per le miscele: polinomi canonici, interpretazione di coefficienti ed effetti. Disegni per miscele: Simplex-Lattice e Simplex-Centroid Designs. Domini sperimentali regolari e irregolari per miscele: limiti inferiore e superiore, consistenza dei limiti, pseudo componenti, determinazione del dominio simplex e numero di vertici. Disegni sperimentali per miscele con domini regolari e irregolari. Punti candidati per domini irregolari. Disegni D-optimal e identificazione del punto di controllo per miscele. Strategie per la selezione di componenti significative per ottimizzare la funzionalità della formulazione. Approcci per lo studio di sistemi

comprendenti miscele e fattori indipendenti. Esempi di applicazioni del disegno sperimentale per lo studio di formulazioni.

Esperienze pratiche in laboratorio per acquisire strumenti e metodi di analisi.

## **Prerequisiti**

Nozioni di base sui principali indici statistici elementari, richiami di analisi multivariata, concetto di varianza sperimentale, capacità operativa informatica di base nelle esperienze pratiche in laboratorio.

## **Modalità didattica**

Il corso si suddivide in una parte di lezioni ed esercitazioni frontali, in cui vengono fornite le nozioni teoriche e pratiche. Alla parte frontale sono poi affiancate esperienze pratiche di laboratorio per acquisire gli strumenti e le modalità operative dei metodi analitici per la chimica delle formulazioni.

Nel periodo di emergenza Covid-19 le lezioni si svolgeranno da remoto sincrono.

## **Materiale didattico**

Vengono fornite le slide delle lezioni sulla pagina e-learning del corso. Inoltre, i docenti forniscono tramite piattaforma e-learning un libro elettronico sui fondamenti del disegno sperimentale. \_\_\_\_\_  
\_affrontare\_pratiche\_

## **Periodo di erogazione dell'insegnamento**

Secondo semestre

## **Modalità di verifica del profitto e valutazione**

L'esame consiste in una prova orale in cui sono discussi gli argomenti presentati nelle lezioni. Oltre all'apprendimento delle nozioni fondamentali esposte nel corso, vengono valutate anche le capacità e attitudini dello studente ad adattare i fondamenti teorici a particolari condizioni operative e pratiche; viene inoltre valutata la capacità espositiva e adeguatezza del linguaggio dello studente. Non sono previsti salti di appello. L'esame può essere sostenuto a richiesta in lingua inglese.

Nel periodo di emergenza Covid-19 gli esami orali saranno solo telematici. Verranno svolti utilizzando la

piattaforma WebEx e nella pagina e-learning dell'insegnamento verrà riportato un link pubblico per l'accesso all'esame di possibili spettatori virtuali.

## **Orario di ricevimento**

Previo appuntamento tramite e-mail, il docente è sempre disponibili a ricevere gli studenti nei loro uffici.

---