

Milano Chemometrics and QSAR Research Group

Roberto Todeschini

Davide Ballabio

Viviana Consonni

chemometrics

molecular descriptors

QSAR

multicriteria decision making

environmetrics

experimental design

artificial neural networks

statistical process control



Department of Earth and Environmental Sciences

University of Milano - Bicocca

P.za della Scienza, 1 - 20126 Milano (Italy)

Website: <http://www.michem.unimib.it/>



AMBITI di RICERCA

- Quantitative Structure-Activity Relationships (REACH)
- Studio e sviluppo di descrittori molecolari
- Pianificazione degli esperimenti
- Decisioni con criteri multipli:
 - indici di qualità
 - liste ordinate di priorità
 - valutazione di scenari alternativi

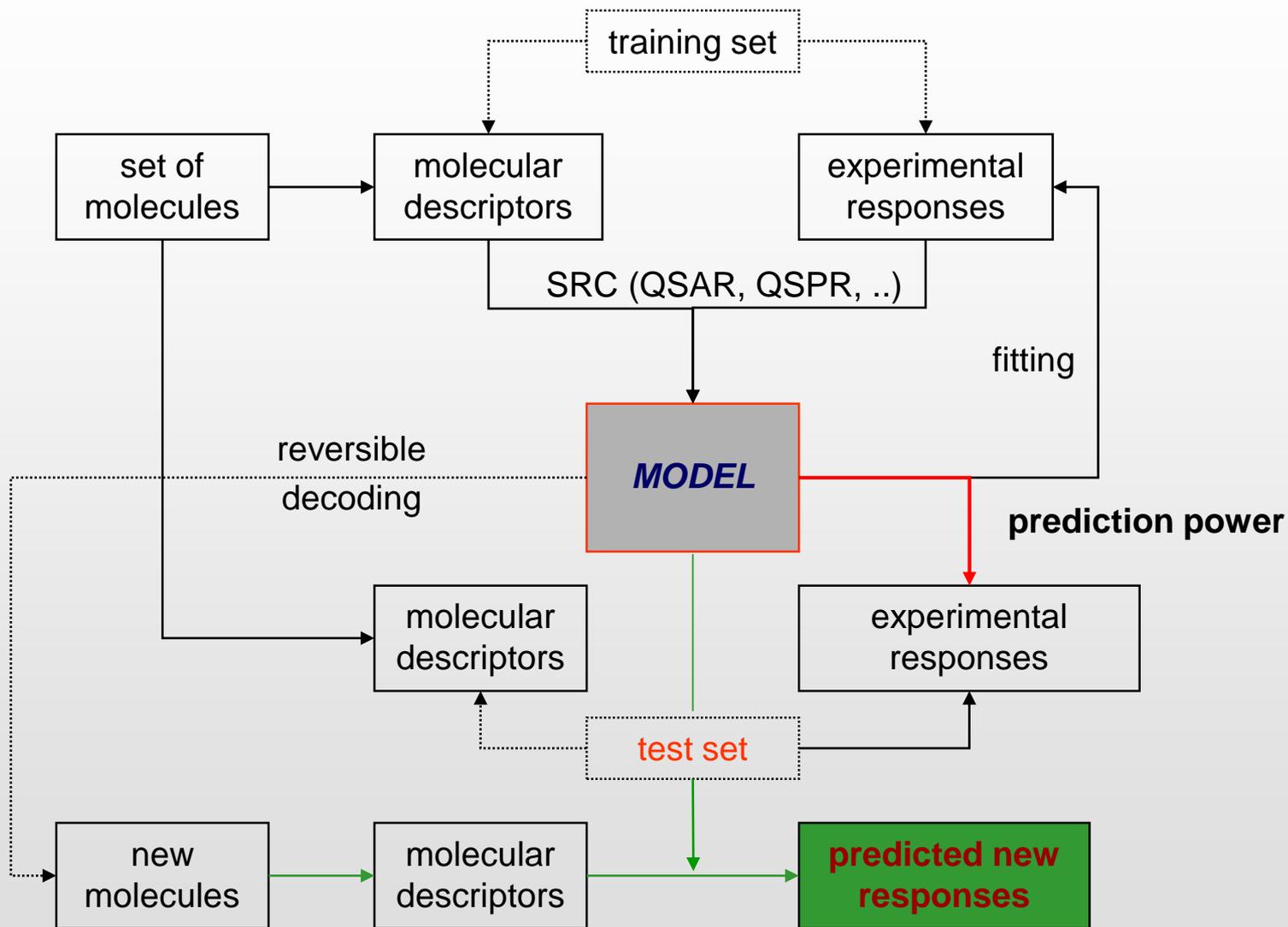
METODI COMPUTAZIONALI

Metodi chemiometrici e chemoinformatici

Metodologia della ricerca sperimentale

Metodi decisionali multi-criterio

Quantitative Structure-Activity Relationships





La filosofia della chemiometria

Sistemi complessi



analisi multivariata del problema
ricerca dell'informazione rilevante
modelli validati con finalità predittive
sintesi dell'informazione rilevante



La filosofia della chemiometria

Sistemi complessi

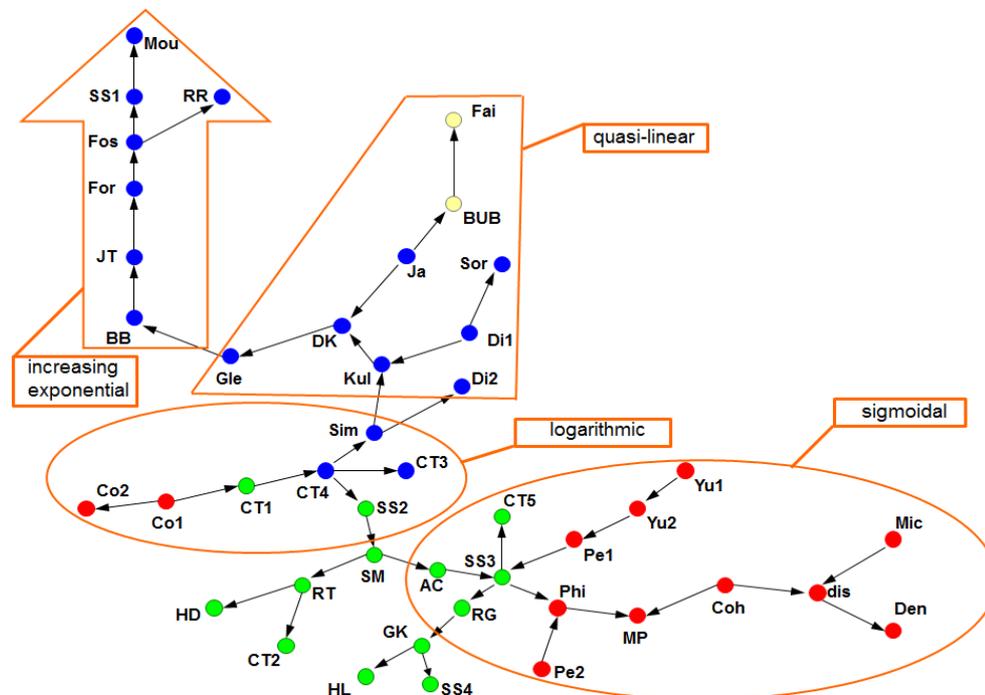


Data Science



TESI di LAUREA MAGISTRALE

- Confronto tra metodi
- Sviluppo di nuovi metodi
- Studio di nuovi descrittori molecolari

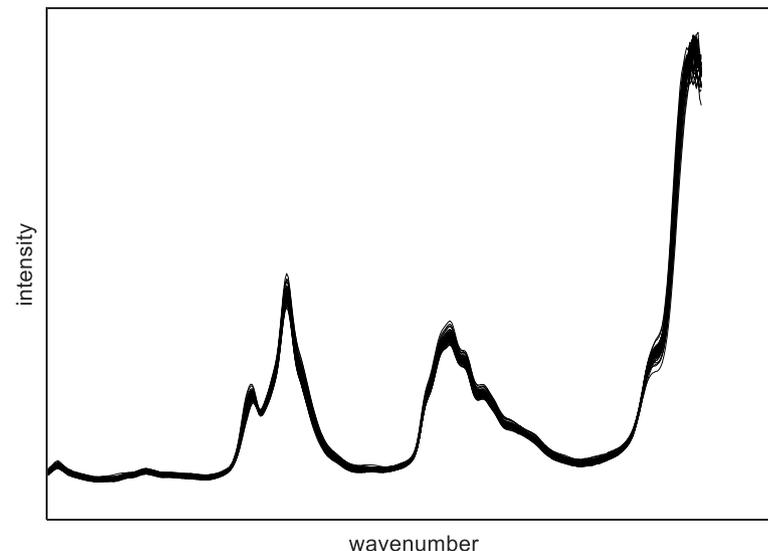


-
- Studio delle capacità modellistiche di descrittori molecolari
- Applicazioni dei metodi QSAR a problemi specifici
- Applicazioni dei metodi chemiometrici a problemi specifici



TESI di LAUREA TRIENNALI

- **Analisi di dati (spettroscopia) con applicazioni:**
 - **Ambientali**
 - **Alimentari**
 - **Beni culturali**
- **Tirocini esterni su disegno sperimentale e applicazioni analitiche.**





COMPETENZE ACQUISIBILI

- ✓ **Utilizzo di metodi modellistici avanzati**
- ✓ **Utilizzo di metodi per la pianificazione degli esperimenti**
- ✓ **Utilizzo di software specialistici**
- ✓ **Conoscenze di programmazione informatica**
- ✓ **Utilizzo di descrittori molecolari**
- ✓ **Ricerca bibliografica**

- ✓ **Interazioni con ricercatori con competenze diverse**
- ✓ **Interazioni con ricercatori stranieri**
- ✓ **Partecipazione a progetti di ricerca**
- ✓ **Publicazioni scientifiche**

Milano Chemometrics and QSAR Research Group

Roberto Todeschini



Davide Ballabio

Viviana Consonni



Website: <http://www.michem.unimib.it/>

