

## Chemiometria, metabolomica e analisi dati

*Quantitative Analytical Chemistry and Data Analysis*

<b>A.A.</b>	2025/2026	<b>CdS</b>	Chimica
<b>Codice</b>	8067861	<b>Canale</b>	UNICO
<b>CFU</b>	6 totali, così ripartiti 2 (Fabiana Arduini) 2 (Daniel Oscar Cicero) 2 (Gabriele Magna)	<b>Lingua</b>	Italiano

### DOCENTE RESPONSABILE

**Fabiana Arduini**

### CODOCENTI

**Daniel Oscar Cicero, Gabriele Magna**

### OBIETTIVI FORMATIVI

<b>Italiano</b>	<p><b>OBIETTIVI FORMATIVI:</b></p> <p>Per fornire agli studenti i concetti di base della chimica analitica, verranno illustrati i fondamenti della chemometria e la loro applicazioni in alcuni casi di studio. Il corso mira ad illustrare le principali caratteristiche della chimica analitica quantitativa e degli algoritmi multivariati e le loro potenziali applicazioni nel campo della chimica analitica.</p> <p>L'obiettivo della metabolomica è di identificare e quantificare la composizione biochimica completa di un campione biologico. Con l'aumento dell'informazione provenienti dalla genomica, trascrittomica e proteomica, c'è un bisogno crescente di capire il fenotipo metabolico che questi geni e proteine controllano. D'altra parte, la chemometria si riferisce all'uso di modelli matematici, principi statistici ed altri modelli logici nell'ambito della chimica, e in particolare della chimica analitica. Si tratta di un ambito interdisciplinare che coinvolge statistica multivariata, modellazione matematica, computer science e chimica analitica.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• I principali campi di interesse includono:             <ul style="list-style-type: none"> <li>- Calibrazione, validazione e prove di significatività</li> <li>- Ottimizzazione di misure sperimentali</li> <li>- Estrazione dell'informazione chimica dalle misure chimiche e dati sperimentali</li> </ul> </li> </ul> <p><b>CONOSCENZA E CAPACITÀ DI COMPrensIONE:</b></p> <p>Gli studenti devono essere in grado di valutare in modo indipendente l'uso di tecniche univariate e multivariate per risolvere compiti pratici. Gli studenti dovranno essere in grado di valutare i risultati ottenuti. Potranno inoltre discutere la metodologia di elaborazione dei dati ottenuti dai principali strumenti analitici o piattaforme sensoriali. Lo studente dovrà essere in grado di valutare autonomamente le possibili piattaforme analitiche utilizzate in metabolomica, ed i risultati dell'analisi statistica del profilo metabolico. Lo studente sarà in grado di utilizzare diversi strumenti bioinformatici per l'analisi dei pathway biochimici rilevanti per i diversi studi.</p> <p><b>CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPrensIONE:</b></p> <p>Gli studenti dovranno essere capaci di valutare in modo indipendente l'utilizzo di tecniche di data analisi univariata e multivariata per risolvere problemi pratici. Gli studenti dovranno saper valutare i risultati ottenuti dai principali strumenti analitici o dalle piattaforme multisensoriali. Gli studenti dovranno valutare quali metodi utilizzare in ambito metabolomico e commentare i risultati delle analisi statistiche del profilo metabolomico.</p>
-----------------	--



	<p>Infine lo studenti dovrà essere capace di utilizzare differenti strumenti bioinformatici per l'analisi di pathway metabolomici relativamente a diversi casi di studio.</p> <p><b>AUTONOMIA DI GIUDIZIO:</b> Lo studente dovrà essere in grado di sapere valutare in maniera autonoma le possibili piattaforme analitiche utilizzate in metabolomica, e i risultati dell'analisi statistico del profilo metabolico. Dovrà inoltre poter utilizzare diversi strumenti bioinformatici per l'analisi dei pathways biochimici attinenti ai diversi studi.</p> <p><b>ABILITÀ COMUNICATIVE:</b> Alla fine dell'insegnamento lo studente dovrà essere in grado di utilizzare un linguaggio tecnico rigoroso.</p> <p><b>CAPACITÀ DI APPRENDIMENTO:</b> Il corso di insegnamento tenderà a stimolare nello studente la capacità di intraprendere studi accademici di livello superiore con un sufficiente grado di autonomia o di continuare la propria formazione professionale.</p>
Inglese	<p><b>LEARNING OUTCOMES:</b> <i>To provide students with basic of analytical chemistry, chemometric concepts, and their application to metabolomics case studies. The course aims to illustrate the principal features of quantitative analytical chemistry and multivariate algorithms and show some of their potential applications in the field of analytical chemistry.</i></p> <p><i>The goal of metabolomics is to identify and quantify the complete biochemical composition of a biological sample. With the increase of information from genomics, transcriptomics and proteomics, there is a growing need to understand the metabolic phenotype that these genes and proteins control. On the other hand, chemometrics refers to the use of mathematical models, statistical principles, and other logical methods in chemistry, particularly analytical chemistry. It is an interdisciplinary field involving multivariate statistics, mathematical modeling, computer science, and analytical chemistry.</i></p> <p><i>Major fields include:</i></p> <ul style="list-style-type: none"><li>- Calibration, validation, and significance testing</li><li>- Optimization of chemical measurements and experimental procedures</li><li>- Extraction of maximum relevant chemical information from available analytical data</li></ul> <p><b>KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING:</b> <i>Students must be able to independently evaluate the use of univariate and multivariate techniques to solve practical tasks. Students must be able to evaluate the results obtained. They will also be able to discuss the methodology of processing data obtained from the main analytical instruments or sensory platforms. The student must be able to independently evaluate the possible analytical platforms used in metabolomics, and the results of the statistical analysis of the metabolic profile. The student will be able to use different bioinformatics tools for the analysis of the biochemical pathways relevant to the different studies.</i></p> <p><b>APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING:</b> <i>Students must be capable of independently evaluating the use of univariate and multivariate data analysis techniques to solve practical problems. Students must know how to evaluate the results obtained from the main analytical instruments or multisensory platforms. Students must evaluate which methods to use in the metabolomics field and comment on the results of the statistical analyses of the metabolic profile. Finally, the student must be capable of using different bioinformatics tools for the analysis of metabolomic pathways relative to different case studies.</i></p> <p><b>MAKING JUDGEMENTS:</b> <i>The students must be able to independently evaluate the use of univariate and multivariate techniques to solve practical tasks. The students will be able to evaluate the results obtained. They will be also able to discuss the method to elaborate data obtained by the main analytical instruments or sensorial platforms. The student should be able to</i></p>



	<p><i>independently evaluate the possible analytical platforms used in metabolomics, and the results of the statistical analysis of the metabolic profile. The student will be able to use different bioinformatics tools for the analysis of biochemical pathways relevant to the different studies.</i></p> <p><b>COMMUNICATION SKILLS:</b> <i>At the end of the teaching sessions the student will be able to use a rigorous technical language.</i></p> <p><b>LEARNING SKILLS:</b> <i>The teaching course will aim to stimulate the student's ability to undertake higher level academic studies with a sufficient degree of autonomy or to continue their professional training.</i></p>
--	---

### PREREQUISITI

<b>Italiano</b>	Concetti di base riguardo i principi di vettori, matrici, e di statistica. La conoscenza alla base della statistica, chimica analitica quantitativa, MR, spettroscopia, spettrometria di massa e biochimica.
<i>Inglese</i>	<i>Basic concepts about principles of vector and matrix algebra, and statistics are required. Knowledge of basic principles of statistics, chimica analitica quantitativa, NMR spectroscopy, mass spectrometry, and biochemistry.</i>

### PROGRAMMA

<b>Italiano</b>	<p>Il corso è strutturato in tre moduli complementari. La parte iniziale del corso (16 ore) tratterà i concetti di base della chimica analitica e dalla White Chemistry. Gli argomenti trattati includono:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- Introduzione alla chimica analitica quantitativa, ai parametri analitici includendo precisione, esattezza, accuratezza, ripetibilità, riproducibilità, limite di rivelamento, limite di quantificazione, effetto matrice, 2002/657/CE. Green e White analytical chemistry</li><li>- Analisi univariata</li><li>- Principi di base di sensori e biosensori, applicazioni biomediche, ambientali, per la difesa ed il campo agroalimentare per il rilevamento di analiti utilizzando l'analisi univariata.</li></ul> <p>La seconda parte del corso, sempre della durata di 16 ore, riguarderà invece i fondamenti della chemometria e dell'analisi multivariata. Durante questa parte del corso saranno trattati i seguenti argomenti:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- Introduzione al trattamento statistico dei dati. Analisi statistica: PDF, media e varianza, distribuzione normale, intervallo di fiducia. Applicazione dei test di significatività (t-test, F-test, chi quadro, ANOVA).</li><li>-Normalizzazione dei dati. Proprietà di vettori e matrici.</li><li>- Algoritmi di analisi dati multivariati: Multiple Linear regression, Principal Component Analysis, Partial-least square (PLS e PLS-DA). Validazione ed ottimizzazione dei parametri (cross-validation, Leave one out, k-fold, venetian blind, validation dataset).</li><li>- Algoritmi di pattern recognition (Radar plot, k-NN, cluster analysis, dendogram, LDA, Mahalanobis distance, SIMCA).</li><li>- Principi di base del naso elettronico.</li></ul> <p>Infine, l'ultima parte del corso (16h) introdurrà i concetti principali della metabolomica, le principali tecniche spettroscopiche utilizzate con particolare attenzione all'applicazione in quest'ambito dei metodi analitici e chemometrici precedentemente trattati. Gli argomenti trattati in questa fase sono:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- Identificazione di metaboliti utilizzando databases online</li><li>- Mappatura dei dati di metabolomica nei diversi pathways biochimici</li></ul>
-----------------	--



	<ul style="list-style-type: none"><li>- Tecniche utilizzate per l'estrazione dei metaboliti e l'analisi dei campioni per ottenere dati metabolomici: HPLC e GC-MS, NMR. Approfondimenti tecnici di queste spettroscopie per l'analisi di miscele complesse.</li><li>- Esempi di applicazione: studi di malattie cardiovascolari, studi di diagnostica nel cancro.</li><li>- Esercitazioni comprendenti l'uso di GC_MS e NMR con campioni di prova e analisi dei dati.</li><li>- Analisi dati univariata e multivariata (PCA, PLS, OPLS-DA, ROC curve). Introduzione all'uso di software dedicato. Esercizi di analisi dati.</li><li>- Identificazione di metaboliti utilizzando database disponibili online.</li><li>- Mappatura dei differenti pathway biochimici</li><li>- Esercizi che includono l'uso di GC-MS e NMR con campioni di test e analisi dati.</li></ul>
Inglese	<p><i>The course is structured into three complementary modules. The initial part of the course (16 hours) will cover the basic concepts of analytical chemistry and White Chemistry. The topics covered will be:</i></p> <ul style="list-style-type: none"><li>- <i>Introduction of quantitative analytical chemistry, analytical parameters including precision, trueness, accuracy, repeatability, reproducibility, limit of detection, limit of quantification, matrix effect, 2002/657/CE. Green and White Analytical Chemistry.</i></li><li>- <i>Univariate analysis.</i></li><li>- <i>Basic principle of sensors and biosensors, applications in biomedical, environmental, defense, and agrifood fields for analyte detection using univariate analysis.</i></li></ul> <p><i>The second part of the course, also lasting 16 hours, will cover the fundamentals of chemometrics and multivariate analysis. During this part of the course the following topics will be covered:</i></p> <ul style="list-style-type: none"><li>- <i>Introduction to statistical treatment of data. Statistical analysis: PDF, average and variance, normal distribution, confidence interval. Application of tests of significance (t-test, F-test, chi-squared, ANOVA).</i></li><li>- <i>Data normalization (autoscaling and linear normalization). Vector and Matrix properties.</i></li><li>- <i>Multivariate Data Algorithms: Multiple Linear regression, Principal Component Analysis, Partial-least square (PLS e PLS-DA). Validation and parameter optimization (cross-validation, Leave one out, k-fold, venetian blind, validation dataset). Pattern recognition algorithms (Radar plot, k-NN, cluster analysis, dendrogram, LDA, Mahalanobis distance, SIMCA).</i></li><li>- <i>Basic principles of electronic noses.</i></li></ul> <p><i>Finally, the last part of the course (16h) will introduce the main concepts of metabolomics, the main spectroscopic techniques used with particular attention to the application in this area of the previously discussed analytical and chemometric methods. The topics covered in this phase are:</i></p> <ul style="list-style-type: none"><li>- <i>Metabolomics and applications in clinical biochemistry, environmental science, food science, and pharmacology.</i></li><li>- <i>Techniques used for metabolite extraction and sample analysis to obtain metabolomics data: HPLC- and GC-MS, NMR. Technical insights into these spectroscopies for analysis of complex mixtures.</i></li><li>- <i>Data analysis: univariate and multivariate methods. Principles of PCA, PLS, OPLS-DA, ROC curves. Introduction to the use of dedicated software. Data analysis exercises.</i></li><li>- <i>Identification of metabolites using online databases</i></li><li>- <i>Mapping of metabolomics data to different biochemical pathways</i></li><li>- <i>Application examples: cardiovascular disease studies, diagnostic studies in cancer.</i></li><li>- <i>Exercises including the use of GC-MS and NMR with test samples and data analysis.</i></li></ul>

## TESTI ADOTTATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano	Testi adottati: Otto, Matthias, Chemometrics - Statistics And Computer Application In Analytical Chemistry 2E, ISBN 10: 3527314180 / ISBN 13: 9783527314188, Editore: Wiley-VCH, 2007, Lingua: Inglese.
----------	--



	Bibliografia di riferimento: Articoli scientifici recenti su tematiche specifiche trattate durante il corso.
<i>Inglese</i>	<i>Adopted texts:</i> <i>Otto, Matthias, Chemometrics - Statistics And Computer Application In Analytical Chemistry 2E, ISBN 10: 3527314180 / ISBN 13: 9783527314188, Editor: Wiley-VCH, 2007.</i> <i>Reference Bibliography:</i> <i>Updated articles on specific topics</i>

### MODALITÀ DI SVOLGIMENTO

<b>Italiano</b>	Il corso si svolge principalmente attraverso lezioni frontali e presentazioni power point preparate dal docente. Sono previste almeno tre esperienze pratiche di laboratorio. Esperti possono anche essere invitati a tenere lezioni su argomenti specifici.
<i>Inglese</i>	<i>The course is carried out mainly through lectures and power point presentations prepared by the instructor. Three practical experiences are also planned as laboratory activities. Experts may also be invited to provide lectures on specific topics.</i>

### MODALITÀ DI VALUTAZIONE

#### Prova orale

<b>Italiano</b>	<p>L'esame consiste in un colloquio orale volto a verificare il livello di conoscenza degli argomenti svolti e valutare la capacità di utilizzare le conoscenze in contesti applicativi.</p> <p>La prova di esame valuta la preparazione complessiva dello studente: dalla capacità di integrazione delle conoscenze dei contenuti del corso alla capacità di analisi degli argomenti fino all'elaborazione di giudizi autonomi sulle tematiche del corso. Inoltre, vengono valutate la proprietà di linguaggio e la chiarezza espositiva, in aderenza con i descrittori di Dublino (1. Conoscenza e capacità di comprensione - knowledge and understanding; 2. Capacità di applicare la conoscenza e comprensione - applying knowledge and understanding; 3. Autonomia di giudizio - making judgements; 4. Capacità di apprendimento - learning skills; 5. Abilità di comunicazione - communication skills).</p> <p>Il voto finale terrà conto per il 70% della completezza delle conoscenze acquisite e per il 30% delle capacità espressive e di giudizio autonomo dimostrate dallo studente.</p> <p>Il voto finale dell'esame si esprime in trentesimi e si otterrà attraverso il seguente sistema di graduazione:</p> <p>Non idoneo: importanti carenze nella conoscenza e comprensione degli argomenti; limitate capacità di analisi e sintesi, frequenti generalizzazioni e limitate capacità critiche e di giudizio, argomenti esposti in modo non coerente e con linguaggio inappropriato</p> <p>18-20: conoscenza e comprensione degli argomenti appena sufficiente con possibili generalizzazioni e imperfezioni; capacità di analisi sintesi e autonomia di giudizio sufficienti, argomenti esposti in modo frequentemente poco coerente e con un linguaggio poco appropriato</p> <p>21-23: Conoscenza e comprensione degli argomenti poco più che sufficiente; capacità di analisi e di sintesi sufficientemente approfondite e linguaggio appropriato</p> <p>24-26: Discreta conoscenza e comprensione degli argomenti; buone capacità di analisi e sintesi esposte in modo rigoroso, linguaggio non sempre appropriato</p> <p>27-29: Conoscenza e comprensione degli argomenti profonda; notevoli capacità di analisi e sintesi. Buona autonomia di giudizio. Argomenti esposti in modo rigoroso e con linguaggio appropriato</p> <p>30-30L: Livello di conoscenza e comprensione degli argomenti ottimi. Ottime capacità di analisi, di sintesi e di autonomia di giudizio. Esposizione originale e con linguaggio appropriato.</p>
-----------------	---



<i>Inglese</i>	<p><i>This exam consists in an oral test. The oral test is aimed at verifying the learning of the arguments of the course.</i></p> <p><i>The examination assesses the student's overall preparation: from the ability to link and correlate the course contents to the ability to analyse the course topics and to make independent judgements. In addition, the language and clarity of exposition are assessed, in accordance with the Dublin descriptors (1. Knowledge and understanding; 2. Ability to apply knowledge and understanding; 3. Autonomy of judgment; 4. Learning skills; 5.)</i></p> <p><i>The final grade will take into account 70% of the completeness of the knowledge acquired and 30% of the expressive abilities and autonomous judgement demonstrated by the student.</i></p> <p><i>The examination will be assessed according to the following criteria:</i></p> <p><i>Not suitable: important deficiencies in the knowledge and understanding of the topics; limited ability to analyse and synthesise, frequent generalisations and limited critical and judgmental skills; topics exposed in an inconsistent manner and with inappropriate language</i></p> <p><i>18-20: knowledge and understanding of the subjects just sufficient with possible generalisations and imperfections; capacity for analysis, synthesis and autonomy of judgement sufficient; subjects exposed in a frequently inconsistent way and with inappropriate language</i></p> <p><i>21-23: Knowledge and comprehension of the topics little more than sufficient; ability to analyse and synthesise in sufficient depth; subjects exposed with appropriate language.</i></p> <p><i>24-26: Fair knowledge and understanding of the subjects; good ability to analyse and synthesise; not always appropriate language</i></p> <p><i>27-29: In-depth knowledge and understanding of the topics; considerable capacity for analysis and synthesis. Good autonomy of judgement. Arguments presented in a rigorous manner and with appropriate language.</i></p> <p><i>30-30L: Level of knowledge and understanding of the topics excellent. Excellent capacity for analysis, synthesis and independent judgement. Original exposition and appropriate language.</i></p>
----------------	---

## **MODALITÀ DI FREQUENZA**

### **Frequenza facoltativa**

<b>Italiano</b>	<p>2 lezioni a settimana di due ore accademiche</p> <p>Il corso comprende: 40 ore di lezioni frontali 12 ore di attività pratiche</p>
<i>Inglese</i>	<p><i>2 lessons per week lasting 2 academic hours</i></p> <p><i>The course comprises:</i> <i>40 hours of lectures</i> <i>12 hours of practical activities</i></p>