

Prova scritta

Traccia n. 1

Il candidato presenti e discuta le tecniche esplorative di dati multivariati nel campo chemiometrico, con particolare riferimento a metodi e strumenti di visualizzazione grafica dei dati, tenendo anche in considerazione il capacity planning relativo al sistema di calcolo e alla possibilità di gestione di big data.

Traccia n. 2

Il candidato identifichi e definisca i criteri necessari alla progettazione di un sistema informatico di calcolo per applicazioni di modelli QSAR, facendo riferimento ai principi teorici e ai passaggi procedurali idonei per la costruzione e la validazione di un modello QSAR.

Traccia n. 3

Il candidato discuta le problematiche connesse all'allestimento di un set di dati specifico per la predizione di proprietà ecotossicologiche di sostanze organiche, mediante modelli QSAR, con particolare riferimento all'identificazione e alla gestione delle potenziali fonti di dati, alla codifica delle strutture chimiche di riferimento, ivi compresa la verifica del contenuto informativo del set di dati stesso e all'adozione di soluzioni on premises piuttosto che in cloud.