

TRACCE PROVA SCRITTA

TRACCIA N. 1

1. Nell'ambito delle relazioni quantitative struttura-attività (QSAR), lo sviluppo di un modello predittivo richiede una sequenza rigorosa di passaggi metodologici. Il/la candidato/a illustri l'intero flusso operativo per la costruzione e la successiva validazione di un modello QSAR finalizzato alla predizione dell'attività biologica molecolare, descrivendo i requisiti concettuali e pratici che guidano ciascuna fase del processo.
2. Nell'ambito delle relazioni quantitative struttura-attività (QSAR), la presenza di un numero elevato di descrittori molecolari introduce frequentemente problemi di ridondanza e rumore nell'informazione. Si descrivano i principali approcci e le metodologie di selezione delle variabili impiegate nel contesto QSAR, evidenziando i criteri con cui tali tecniche consentono di individuare i descrittori maggiormente informativi.
3. Il/la candidato/a descriva i principali ambiti di utilizzo dei linguaggi Java e C++ in ambito tecnico-scientifico e di analisi dati, evidenziandone caratteristiche e vantaggi operativi.

TRACCIA N. 2

1. La chemiometria offre strumenti differenti a seconda che l'obiettivo sia la comprensione della struttura dei dati o la predizione di una proprietà. Il/la candidato/a metta a confronto l'Analisi delle Componenti Principali (PCA) e la regressione dei minimi Quadrati (Ordinary Least Squares, OLS) applicate a dataset QSAR, definendo formalmente le differenze concettuali e operative che distinguono l'approccio esplorativo da quello predittivo supervisionato.
2. La tendenza di un modello ad adattarsi eccessivamente ai dati di calibrazione rappresenta uno dei principali rischi nella modellistica QSAR. Si affronti la tematica dell'overfitting, definendone la natura ed esplicitando le cause. Il/la candidato/a descriva quindi le principali strategie e procedure di validazione utilizzate per accertare la stabilità e la reale capacità predittiva del modello.
3. Il/la candidato/a spieghi che cosa si intende per macchina virtuale e quali vantaggi può offrire nell'esecuzione di software e applicazioni in un contesto di analisi dati e ricerca.

TRACCIA N. 3

1. Per garantire l'accettabilità regolatoria e l'affidabilità dei modelli QSAR, l'Organizzazione per la Cooperazione e lo Sviluppo Economico (OECD) ha stabilito requisiti standardizzati. Il/la candidato/a illustri i 5 principi guida dell'OECD per la calibrazione e validazione dei modelli QSAR, esplicitando il significato concettuale di ciascun punto.
2. Il/la candidato/a descriva come viene definito il Dominio di Applicabilità (Applicability Domain, AD) di un modello QSAR e quali metodi possono essere utilizzati per il calcolo del Dominio. Discuta quindi le implicazioni metodologiche e teoriche che emergono quando si tenta di stimare la proprietà di una molecola che ricade all'interno o all'esterno di tale dominio.
3. Il/la candidato/a descriva le principali differenze tra ambiente Microsoft Windows e Linux, evidenziando aspetti che possono risultare rilevanti per l'utilizzo di applicazioni e strumenti di analisi dati.