

## FONDO DI DIPARTIMENTO PER LA RICERCA ANNO 2020

### LINEA: DOTTORATO

La richiesta deve essere inoltrata via mail al Coordinatore del dottorato ([alfonso.pedone@unimore.it](mailto:alfonso.pedone@unimore.it)) e al Direttore [direttore@chimgeo.unimore.it](mailto:direttore@chimgeo.unimore.it), entro il 30 Gennaio 2021 ore 24.00

#### Criteri di ammissibilità

Può presentare domanda (secondo lo schema ALLEGATO 1) il personale docente/ricercatore di ruolo afferente al DSCG e al Dottorato M3ES. Sono ammesse domande sia di singoli che di gruppi. Ciascun partecipante alla data di presentazione della domanda deve rispettare i seguenti requisiti:

- Essere un ricercatore attivo secondo definizione MUR-ANVUR
- E' titolo preferenziale non avere ricevuto un cofinanziamento per borsa Dottorato nell'anno precedente

#### ALLEGATO 1

##### **1. Illustrare sinteticamente il Progetto di Tesi (300 parole) coerente con le tematiche M3ES**

Hyperspectral imaging and multimodal spectroscopic are mature non-destructive tool for the analyst, as well as suitable to monitor chemical systems in time, enabling characterization of composition/structure and their spatial and temporal evolution. From the data analysis standpoint, they match the paradigm of Big Data and pose new challenges to state of art chemometrics methodology.

The research project is aimed at exploiting the integration of machine learning, image processing and chemometrics to develop new approaches suitable to be tuned on the basis of sought information while balancing modeling capability and chemical interpretation.

Main focus will be on hyperspectral imaging data, where two different approaches may be currently envisioned. On the one hand, multivariate classification methods aiming at assigning a class label to every pixel. On the other hand, spectral unmixing approaches aiming at identifying individual sources of spectral variations, with each measured pixel now described as a linear mixture of the pure spectra characteristic of those unknown individual sources. For classification, the underlying assumption is that the spectral signature measured at one pixel is characteristic of one type of object (class) only. Thus, mixed pixels represent the major problem for classification approaches. By contrast, spectral unmixing is more difficult due to the inverse nature of the problem and can benefit from the knowledge of the presence of unmixed pixels. However, classification requires (some) pixels to be labelled with class membership for model training. This work will evaluate pros and cons and both approaches, in connection with the structure of the data hand, investigated in both spectral and spatial modes.

Machine learning methods so far have been used in the classification task at pixel level, either starting from spectral of spatial dimension, without unraveling their simultaneous interplay. Novelty is the exploitation of this interplay, as well by matching spectral unmixing and machine learning tools, which should lead to new development.

## 2. Indicare una delle due seguenti opzioni (o entrambe):

- X incremento dell'attrattività (titolo di studio altro ateneo italiano o estero)  
X rafforzamento dell'internazionalizzazione nell'ambito del dottorato internazionale-Lille

## 3. Tutor/s

NOME	COGNOME	RUOLO/ Tipologia di rapporto
Marina	Cocchi	Professore Associato
Cyril	Ruckebusch	Full Professor (LASIRE Lille)
Ludovic	Duponchel	Full Professor (LASIRE Lille)

## 4. Indicare la sede/gruppo di Ricerca (in caso anche più alternative) presso cui sarà svolto il periodo all'estero (specificare se i rapporti di collaborazione sono già in essere o da attivare)

Laboratoire de Spectroscopie pour les Interactions, la Réactivité et l'Environnement CNRS- LASIRE:  
Accordo per Double PhD e collaborazione in essere

## 5. Pubblicazioni del Tutor/s negli ultimi 3 anni

- [1] M. Ahmad, R. Vitale, C.S. Silva, C. Ruckebusch, M. Cocchi  
Exploring local spatial features in hyperspectral image.  
*J. Chemometrics* **2020**, 34, e3295. DOI:10.1002/cem.3295
- [2] N. Cavallini, F. Savorani, R. Bro, M. Cocchi  
Fused Adjacency Matrices to enhance information extraction: the beer benchmark  
*Anal. Chim. Acta*, **2019**, 1061, 70-83.
- [3] M. Li Vigni, J.M. Prats-Montalaban, A. Ferrer, M. Cocchi\*  
Coupling 2D-wavelet decomposition and multivariate image analysis (2D WT-MIA)  
*J. Chemometrics* **2018**, 32, e2970-e2990
- [4] A. Nardecchia, R. Vitale, L. Duponchel  
Fusing spectral and spatial information with 2-D stationary wavelet transform (SWT 2-D) for a deeper exploration of spectroscopic images  
*Talanta* **2021**, 224, 121835.
- [5] A. Nardecchia, C. Fabre, J. Cauzid, F. Pelascini, V. Motto-Ros, L. Duponchel  
Detection of minor compounds in complex mineral samples from millions of spectra: a new data analysis strategy in LIBS imaging  
*Anal. Chim. Acta*, **2020**, 1114, 66-73.
- [6] C. Ruckebusch, R. Vitale, S. Hugelier, N. Omidiki  
Perspective on essential information in multivariate curve resolution  
*Trends in Analytical Chemistry* **2020** 132 116044
- [7] M. Ghaffari, N. Omidikia, C. Ruckebusch  
Perspective on essential information in multivariate curve resolution

Analytical Chemistry 2019 91 10943

## 6. Risultati Attesi e Indicatori di raggiungimento

Risultati attesi	Target intermedio (coincide con la valutazione del dottorando per l'ammissione all'anno successivo, specificare i target primo anno, secondo anno)		Target finale (36 mesi)	
	Nazionali	Internazionali	Nazionali	Internazionali
Numero di lavori scientifici pubblicati o accettati per la pubblicazione in tipologie di riviste valutate VQR e/o brevetti di tipologia VQR	End of 1 <sup>st</sup> year: 1 End of 2 <sup>nd</sup> year: 1		3	
Numero di lavori/comunicazioni ai convegni con un coautore straniero	End of 1 <sup>st</sup> year: 2 End of 2 <sup>nd</sup> year: 2		6	
Numero di comunicazioni a convegno presentate dal dottorando in qualità di relatore	End 1 <sup>st</sup> year: 1 End 2 <sup>nd</sup> year: 1	End 1 <sup>st</sup> year: 0 End 2 <sup>nd</sup> year: 1	3	1

## 5. Cofinanziamento:

Fondo/i	Importo
CNRS-LASIRE	30000
Totale Richiesto al Dipartimento	30000

Data 27/01/2021

Firma/e Proponente/i

