

RICCARDO LESSI

Istruzione

Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche | 03/12/2025

Voto di Laurea: 103/110

Tesi di Laurea: "L'informatica a supporto di tecniche analitiche in chimica farmaceutica: sviluppo di applicazioni per il riconoscimento dei medicinali, mediante spettroscopia IR e saggi di identificazione"

Riepilogo delle competenze

Python: conoscenza avanzata del linguaggio, approfondita durante la tesi di laurea incentrata sullo sviluppo di due applicazioni web progettate e realizzate interamente in Python.

RDKit e scikit-learn: utilizzo di RDKit per la visualizzazione 2D di molecole a partire da SMILES, ricerca di sottostrutture tramite SMARTS, evidenziazione di gruppi funzionali e generazione di Morgan Fingerprints per analisi di similarità e input a modelli di machine learning. Con scikit-learn, sviluppo di modelli supervisionati (Random Forest) e non supervisionati (NearestNeighbors), creazione di pipeline modulari per concatenare preprocessing e modello, e valutazione delle prestazioni dei modelli tramite metriche standard e Leave-One-Out cross-validation.

Matplotlib: esperienza nella generazione di grafici lineari, scatter, istogrammi, boxplot e grafici complessi, con personalizzazione di assi, colori, legende e annotazioni. Utilizzo per l'analisi dei risultati di modelli di machine learning e la visualizzazione di dati chimici.

Shiny: competenze avanzate nello sviluppo di dashboard interattive e applicazioni web per la gestione e analisi di dataset complessi. Integrazione con Python, RDKit e Matplotlib per workflow di chemoinformatica e machine learning. Esperienza nello sviluppo modulare e scalabile di progetti complessi, gestione di input utente reattivi, layout personalizzati e integrazione di librerie di terze parti.

Gestione e condivisione dei dati: esperienza nella creazione e gestione di database di laboratorio contenenti dati di saggi chimici (riconoscimento di molecole organiche) e spettri IR. Sviluppo di due applicazioni Shiny per gestione, visualizzazione interattiva e analisi dei dati, con applicazione di principi di programmazione modulare, scalabilità e riutilizzo del codice.

Software basati su campi di interazione molecolare (MIF): conoscenza acquisita durante il corso universitario "principi di modellazione molecolare", con utilizzo di **FLAP** e **GRID** per analisi di siti di binding, generazione di campi di interazione molecolare, identificazione di regioni favorevoli al legame e supporto a studi di drug design.