



Curso de posgrado: Quimiometría y Cualimetría

El pago del arancel se deberá realizar mediante transferencia bancaria a la cuenta N° 00313235/89 del Banco de la Nación Argentina, sucursal San Martín N° 3245, a nombre de Universidad Nacional de General San Martín.

Enviar copia de la transferencia realizada vía E-Mail a alumnos3iA@unsam.edu.ar, indicando el nombre del cursante, preferentemente a través de un archivo adjunto escaneado para que el Servicio Administrativo de la UNSAM identifique y registre el pago efectuado. (El mismo efectiviza la inscripción y confirma la vacante).

Nombre de la cuenta: Universidad Nacional de General San Martín
Nombre del banco: Banco de la Nación Argentina
Nombre de sucursal: San Martín
Número de sucursal: 3245
Número de cuenta: 313235/89
Tipo de cuenta: cuenta corriente en pesos
CBU: 01100402-20000313235894
CUIT N°: 30-66247391-6

CONTENIDOS MÍNIMOS DEL CURSO

Primera parte: Técnicas lineales

Tema 1: Introducción a los problemas de variables múltiples

Aquí se enfoca el problema de caracterizar un sistema. La dificultad o facilidad para caracterizarlo dependerá del número de variables con que se describe el mismo. Al aumentar el número de variables se facilita la caracterización pero se complica la interpretación, por eso la "reducción dimensional" es el objetivo central que buscan las técnicas de análisis lineal. Aquí se muestran en forma introductoria algunos de esos métodos que se analizarán con detalle durante el curso.

"Caracterización" en ciencia y tecnología
Caracterización con múltiples variables
El espacio multidimensional
Necesidad de la reducción dimensional
Dendrogramas
Modelos, Clases y Distancias
Concepto de covarianza, correlación y distancias angulares

Tema 2: Análisis por Componentes Principales, Modelos y Análisis de Factores

Esta es una de las principales técnicas de reducción dimensional y sin duda la más difundida entre las técnicas lineales. Mientras que los cálculos pueden ser “transparentes” al operador, la interpretación de los resultados puede simplificar grandemente el entendimiento de un sistema. Además es una herramienta fundamental para determinar el número de parámetros realmente necesarios para caracterizar un sistema. Otras variantes inspiradas en los mismos principios ofrecen una gama de métodos de análisis de datos.

Análisis por CP a través de un ejemplo de clasificación de especies
Objetivo del análisis. Noción del cálculo. Interpretación de los CP, de los pesos y de los ‘scores’. La reducción dimensional a través de los CP
Otros modelos con principios similares.
El cálculo e interpretación del análisis de factores
Ejemplos de aplicaciones en química analítica

Tema 3: Análisis de “Clusters” (subgrupos)

Este es otro método de reducción dimensional, pero sus principios radican en establecer la similitud entre los integrantes de un conjunto de datos y la posibilidad de observar “clusters” o subgrupos de datos similares. Estas técnicas son una herramienta esencial en tareas de clasificación y pueden aplicarse en forma consecutiva al análisis por CP. Se ejemplifican aquí algunas aplicaciones que van desde el análisis de ‘outlayers’ al estudio de fases móviles en una cromatografía.

Tipos de clasificaciones
Utilidad y cálculo de distintos tipos de distancias
Ejemplos en el campo de la química
Algoritmos de clústering

Epílogo de la primera parte: Modelos y métodos estadísticamente lineales y no lineales.

Segunda parte: Redes neuronales artificiales (RNA)

Las redes neuronales artificiales están inspiradas en el proceso cibernético de las neuronas reales. Estas redes pueden ejecutar sencillas funciones con mucha eficiencia y su característica principal es que pueden aplicarse a sistemas no lineales. Sus utilidades son muy variadas en los campos de la ciencia y la tecnología. Algunos de sus usos generales son la clasificación de objetos, el análisis de la estructura de datos, la optimización de sistemas y el modelado empírico.

Tema 1: introducción general a las redes neuronales artificiales

Origen de las redes neuronales artificiales (RNA)
Utilidades de las RNA en el campo de la ciencia y tecnología
Desde una neurona a una red

Tema 2: Tipos de redes

Red Hopfield
Red ABBAM
Mapas auto-organizados y red Kohonen
Red de contrapropagación

Red de retro-propagación de errores
Aplicaciones prácticas

Tercera parte: Calibración multivariada

Este tópico es esencial en química analítica, pero en realidad es aplicable a la calibración de cualquier instrumento que nos entregue, como resultado de la medición, un vector (ó matriz) de datos en lugar de un dato único. Como es sabido, los instrumentos modernos se caracterizan por brindar una cantidad de información mucho mayor que los de tecnologías pasadas y se hace imprescindible contar con técnicas de cálculo que procesen adecuadamente esta información adicional.

Tema 1: Calibración univariante

El método clásico
El método inverso
La consideración de los errores según el método de calibración

Tema 2: Calibración multivariada

Ventaja de la multidetección
El método clásico
El método inverso
Análisis y regresión por componentes principales
Cuadrados mínimos parciales: PLS1 y PLS2
Sistemas de orden 2: PLS1 trilineal
Validación de los modelos

Cuarta parte: Diseño de experimentos y Modelos empíricos

Hasta ahora se han enunciado algunas técnicas orientadas al tratamiento de datos para extraer información. Sin embargo no nos hemos referido al tema de cómo obtener esa serie de datos. El diseño de experimentos es una técnica esencialmente multivariable. Sus objetivos son optimizar la precisión del cálculo de parámetros utilizando una cantidad mínima de experimentos. Estos métodos apuntan a la obtención de algoritmos que describan un modelo capaz de representar nuestro sistema en estudio.

Además de obtener una forma algorítmica o gráfica del comportamiento de un sistema en estudio, la mayoría de las veces se desea optimizar la (o las) respuesta de un modelo a fin de obtener zonas de respuesta con condiciones ventajosas. Este es el objetivo final del desarrollo de un modelo.

Tema 1: Introducción al diseño de experimentos

Objetivos del diseño experimental
Necesidad del diseño experimental en el campo tecnológico
Esquema general de un proceso de modelado y optimización
Optimización y diseño de experimentos

Tema 2: Distintos tipos de diseños.

Diseño factorial de dos niveles
Diseño factorial fraccionario
Diseño con niveles múltiples
Criterios de calidad del diseño

Diseños simétricos
Diseños de celda uniforme
Diseños asimétricos

Tema 3: Optimización de modelos.

Tecnología de superficies de respuesta
Deseabilidad en modelos con respuestas múltiples.

Epílogo: Discusión teórico-práctica de los criterios para evaluar el armado de un modelo.

BIBLIOGRAFÍA básica

Bibliografía

- ❖ D.L. Massart, B.G.M. Vandeginste, S.N. Deming, Y Michotte and L. Kaufman
ELSEVIER. The Netherlands, 1988.
Chemometrics: a textbook
- ❖ D.L. Massart; B.G.M. Vandeginste; L.M.C. Buydens; S. De Jong; P.J. Lewi and J. Smeyers-Verbeke. Hanbook of Chemometrics and Qualimetrics. Parts A and B. Elsevier, Amsterdam 1997.
- ❖ Jure Zupan; Johann Gasteiger, Neural Networks in Chemistry and Drug Design.
2nd Edition,. Wiley-VCH, Weinheim, 1999.
- ❖ Richard G. Brereton. Introduction to multivariate calibration in analytical chemistry. Analyst, 2000,125, 2125-2154.
- ❖ Teuvo Kohonen
Self-Organizing Maps, Springer-Verlag, Berlin, 1995.
- ❖ Michael Berthold and David J. Hand (Eds.). Intelligent Data Analysis.
Second Edition. Springer-Verlag. Germany. 2003
- ❖ C.F. Jeff Wu and Michel Hamada. Experiments. Planning, análisis and parameter designs optimization. John Willey & Sons, Inc. USA, .2000.
- ❖ Darren Redfern and Colin Campbell. The Matlab 5 Hanbook. Springer-Verlag New Yorc, Inc. 1998.
- ❖ Erwin Baumgartner, Raquel G. Gettar, Francisco D. Mingorance and Jorge F. Magallanes. Application of Factor Analysis to Polarographic Data. Determination of the Number of Species Present in Metal Ion-Ligand Systems. Talanta 36(1989)1111-1115.
- ❖ Jorge F. Magallanes and Cristina Vazquez. Authomatic Clasification of Steels by Processing EDX Spectra with Artifitial Neural Networks. J. Chem. Inf. And Comput. Sci. 38(1998)605-609