

**Curso de posgrado**

**"TÓPICOS DE QUIMIOMETRIA: OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS (ANÁLISIS DE EFECTOS Y SUPERFICIE DE RESPUESTA) Y CLASIFICACIÓN"**



**Docente:** Héctor C. Goicoechea

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)

Laboratorio de Desarrollo Analítico y Quimiometría (LADAQ), Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina.

**Objetivos**

- 1) Brindar a los participantes conocimientos de diseño experimental, análisis de factores influyentes en un proceso y de la metodología de superficie de respuesta, que les permita planificar las actividades científicas de manera adecuada y criteriosa, e interpretar correctamente los datos obtenidos para obtener información significativa a partir de ellos.
- 2) Comprender los principios de los métodos de clasificación y su aplicación a la solución de problemas en diferentes campos de la ciencia.

**Perfil de los alumnos a quienes está orientado el curso**

Alumnos de doctorado y avanzados en estudios de grado de carreras de ciencias experimentales.

**Fechas probables:** a dictar en una semana en septiembre u octubre o noviembre de 2018.

**Carga horaria total y distribución horaria de las actividades**

Carga horaria: 35 horas intensivas a dictar en 5 días consecutivos.

**Número de vacantes:** 30

**Programa Analítico Teórico y Práctico**

**Tema 1. Conceptos estadísticos y análisis de factores.**

**1.1.** Comparación de más de dos tratamientos. Análisis de la varianza con un factor (ANOVA). Comprobación de idoneidad del modelo. Análisis de los residuos. Gráficas en papel probabilístico normal. Análisis de homocedasticidad. Efectos lineales y cuadráticos.

**1.2.** Estudio simultáneo de varios factores. Diseños factoriales de dos factores. Comprobación de la idoneidad del modelo. Estudio de interacciones. Diseños factoriales fraccionados.

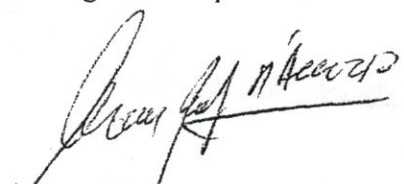
**1.3.** Modelos de regresión. Fases de un estudio mediante regresión lineal. Regresión lineal simple. Regresión lineal múltiple. Inclusión de relaciones no lineales. Validación del modelo. Análisis de los residuos. Puntos influyentes. Regresión múltiple opción *forward*, *backward*, *stepwise*.


**1.4.** Análisis de artículos científicos y discusión de los resultados. Resolución de problemas basados en la literatura científica. Uso del programa Design Expert.

**Tema 2: Metodología de la superficie de respuesta**

**2.1.** Introducción a la metodología de análisis de la superficie de respuesta. Diseños central compuesto, factorial completo, Box-Behnken, Doehlert, D-optimal y de mezclas. Evaluación de los modelos con ajuste por cuadrados mínimos que explican la variabilidad de las respuestas. Análisis de gráficas de superficie y de contorno. Obtención de los puntos estacionarios. Intervalo de confianza de las predicciones.

**2.2.** Uso de transformaciones de la respuesta o modelado con redes neuronales para modelos complejos implícitos o que no siguen los supuestos de normalidad.

  
Dra. NORMA E. D'ACCORSO

  
Dra. Gabriela M. Cabrera  
Directora Adjunta  
Dep'to. de Química Orgánica

2.3. Optimización de sistemas con varias respuestas y factores que requieran condiciones especiales. Superposición de gráficas de contorno. Función deseabilidad.

2.4. Resolución de problemas basados en la literatura científica. Uso del programa Design Expert y de una interfaz gráfica escrita en Matlab para redes neuronales.

### **Tema 3. Clasificación**

3.1. Métodos no supervisados. Análisis de componentes principales (PCA). Análisis de clusters. Uso de PARAFAC para datos de segundo orden.

3.2. Métodos supervisados. Análisis lineal discriminante (LDA). Modelado blando independiente por analogía de clases (SIMCA). Cuadrados mínimos parciales discriminantes para datos vectoriales (PLS- DA) y matriciales (U-PLS- DA y N-PLS- DA).


3.3. Análisis de artículos científicos y discusión de los resultados. Uso de rutinas de Matlab para implementar modelos de clasificación.

### **Bibliografía**

- 1) Myers, RH, Montgomery, D.C, Anderson-Cook, CM.. 2009. Response Surface Methodology. Wiley New Jersey.
- 2) L. A. Sarabia and M. C. Ortiz, University of Burgos, Burgos, Spain. Comprehensive Chemometrics: Response Surface Methodology . Pags: 346-388 2009 Elsevier
- 3) Brereton, R., Chemometrics: data analysis for the laboratory and chemical plant, John Wiley & Sons, Chichester, 2003.
- 4) Barros Neto, B, Scarminio, I S, Bruns R E. 2001. Como fazer experimentos. Livro Texto UNICAMP, Campinas.
- 5) Gutierrez Pulido, H, De la Vara Salazar, R. 2008, Mc Graw-Hill-Interamericana, México.
- 6) Leardi, R. Experimental design in chemistry: A tutorial. Anal. Chim. Acta 652 (2009)161–172.
- 7) Vera Candiotti, L, De Zan MM, Camara, MS, Goicoechea HC, Experimental design and optimization. Applications in analytical methods development with multiple responses. Talanta 124 (2014) 123–138.
- 8) Bezerra, A. M.; Erthal Santelli, R.; Padua Oliveira, E.; Silveira Villar, L.; Escaleira, A. L. Response surface methodology (RSM) as a tool for optimization in analytical chemistry. Talanta 76 (2008) 965–977
- 9) Costa Ferreira, S. L.; Bruns, R. E.; Paranhos da Silva, E. G.; Lopes dos Santos, W. N.; Quintella, C. M.; David, J. M.; Bittencourt de Andrade, J.; Breitreitz, M. C.; Sales Fontes Jardim, I. C.; Barros Neto, B. Statistical designs and response surface techniques for the optimization of chromatographic systems. J.Chromatogr. A. 1158 (2007)2–14.
- 10) Ferreira S.L.C., Bruns R.E., Ferreira H.S., Matos G.D., David J.M., Brandao G.C., da Silva E.G.P., Portugal L.A., dos Reis P.S., Souza A.S., dos Santos W.N.L. (2007). Box-Behnken design: An alternative for the optimization of analytical methods. Anal. Chim. Acta 597 (2007) 179–186.
- 11) Dejaegher B., Vander Heyden Y.. Experimental designs and their recent advances in set-up, data interpretation, and analytical applications. J. Pharm. Biomed. Anal. 56 (2011) 141– 158.

### **Método de evaluación y promoción del Curso.**

Al promediar y finalizar el curso, los alumnos deberán resolver problemas prácticos con datos extraídos de la literatura científica y deberán exponerlos a modo de seminario.

  
Dra. Gabriela M. Cabrera  
Directora Adjunta  
Depto. de Química Orgánica



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Ref. Expte. N° 509.938/18

Ciudad Autónoma de Buenos Aires, 28 AGO 2018

**VISTO**

La nota a foja 1 de la Dirección del Departamento de Química Orgánica, mediante las cuales eleva la información del curso de posgrado **Tópicos en Quimiometría: Optimización de Procesos (Análisis de Efectos y Superficie de Respuesta) y Clasificación** para el año 2018,

**CONSIDERANDO**

Lo actuado por la Comisión de Doctorado,

Lo actuado por la Comisión de Posgrado,

Lo actuado por este cuerpo en la sesión realizada en el día de la fecha,

En uso de las atribuciones que le confiere el Artículo 113° del Estatuto Universitario,

**EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD  
DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
RESUELVE:**

**Artículo 1°:** Aprobar el dictado del nuevo curso de posgrado **Tópicos en Quimiometría: Optimización de Procesos (Análisis de Efectos y Superficie de Respuesta) y Clasificación** de 35 hs. de duración, que será dictado por el Dr. Héctor Casimiro Goicoechea.

**Artículo 2°:** Aprobar el programa del curso de posgrado **Tópicos en Quimiometría: Optimización de Procesos (Análisis de Efectos y Superficie de Respuesta) y Clasificación** obrante a fojas 2 – anverso y reverso-, para su dictado del 1° al 5 de octubre de 2018.

**Artículo 3°:** Aprobar un puntaje máximo de dos (2) puntos para la Carrera del Doctorado.

**Artículo 4°:** Comuníquese a la Dirección del Departamento de Química Orgánica, a la Dirección de Alumnos, a la Secretaría de Posgrado y a la Biblioteca de la FCEyN (con fotocopia del programa incluida). Cumplido archívese.

RESOLUCION CD N°  
SP/ga/17/08/2018

**2097**

Dr. PABLO J. PAZOS  
Secretario Adjunto de Posgrado  
FCEyN - UBA

Dr. JUAN CARLOS REBOREDA  
DECANO