



**FACENA**

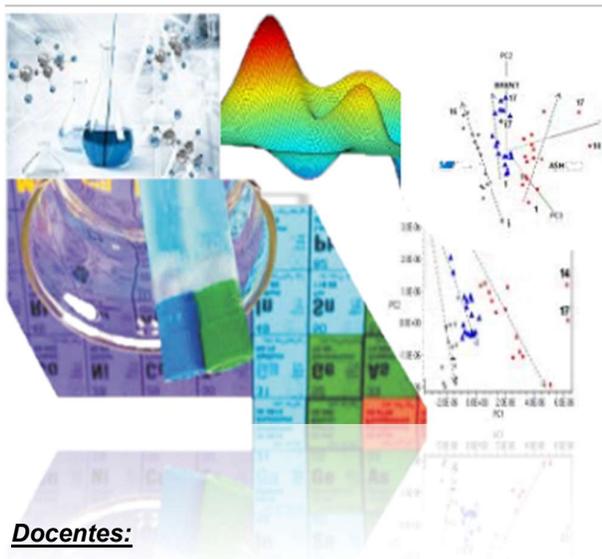
**SIP**

SECRETARÍA DE  
INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES Y AGRIMENSURA  
UNIVERSIDAD NACIONAL DEL NORDESTE

COMUNIDAD UNIVERSITARIA DEL NORDESTE

## CURSO DE POSGRADO “ANÁLISIS DE DATOS MULTIVARIADOS PARA LA CALIBRACIÓN EN QUÍMICA ANALÍTICA” RES. 0999/18 CD



### Docentes:

**Director:** Dr. Héctor C. Goicoechea (FBCB-UNL)

**Docente Coordinador:** Dra. Celina María Monzón (FaCENA – UNNE)

### Dictantes:

Dra. Mirta Raquel Alcaraz (FBCB-UNL)

Dra. Silvana Azcarate (UNLPam),

Dr. Mario Raúl Delfino (h) (FaCENA-UNNE)

**Auxiliar Docente:** Lic. Ramón Alberto Martínez

### Objetivos:

- Presentar la calibración multivariada como una herramienta de la quimiometría que permite analizar datos complejos.
- Identificar los distintos tipos de calibración
- Seleccionar el método adecuado para procesar datos de un problema específico, y utilizar el software apropiado.
- Interpretar casos reales de calibración multivariada.
- Analizar imágenes hiperespectrales de IR.

### Modalidad de enseñanza:

Las clases se desarrollarán con modalidad teórico-práctica, resolución de problemas y manejo de software.

### Destinatarios del curso:

Graduados de las carreras de Bioquímica, Licenciatura en Química, Ingeniería Química, Licenciatura en Física, Licenciatura en Biotecnología, Ingeniería Agronómica, Veterinaria y otras carreras relacionadas.

### Programa:

**Tema 1.** Introducción. Calibración metodológica e instrumental. Estructura de datos uni- y multivariados. Generación de datos multivariados. Ventajas en la calibración proporcionadas por el aumento en el número de vías. Calibración univariada.

**Tema 2.** Pre-procesamiento de datos. Métodos de escalado multidimensional. Comparación de métodos de normalización. Uso de derivadas. Estrategias para manipular datos ruidosos: suavizado (Savitzky-Golay, moving window average) y filtros (Fourier, wavelet).

**Tema 3.** Calibración multivariada de primer orden. Determinación de dos analitos por análisis con dos sensores. Análisis con múltiples sensores. Cuadrados mínimos clásicos (CLS). Cuadrados mínimos inversos (ILS). Regresión en componentes principales (PCR). Cuadrados mínimos parciales (PLS). Uso de rutinas escritas en Matlab y de la interfaz gráfica MVC1.

**Tema 4:** Calibración multivariada de segundo orden. Ventaja de segundo orden. Análisis paralelo de

factores (PARAFAC). Resolución multivariada de curvas-cuadrados mínimos alternantes (MCR-ALS). Métodos basados en bilinealización de los residuos (RBL). Cifras de mérito.

**Tema 5:** Calibración multivariada de tercer orden. Ventajas de su implementación. Análisis paralelo de factores (PARAFAC). Resolución multivariada de curvas-cuadrados mínimos alternantes (MCR-ALS). Análisis paralelo de factores aumentado (APARAFAC).

**Tema 6:** Análisis de imágenes hiperespectrales obtenidas con microscopía IR. Metodología de obtención y usos. Preprocesamiento de las señales para eliminar “bad pixels”. Utilización de MCR-ALS.

**Fecha de Inicio:** 11-03-2019

### Duración:

- Del 11 al 15 de marzo de 2019
- 45hs. presenciales.

### Lugar:

- Aula Posgrado - FaCENA - Av. Libertad 5400.

**Cupo:** Mínimo 20 – Máximo 60.

### Requisitos de aprobación:

- **Aprobación Trabajo Final.**
- **Asistencia al 80 % de las horas de clases.**

### Arancel:

- \$2.500 graduados en general.
- \$1.500 Doctorandos UNNE acreditando su condición de alumno regular.

### Inscripciones:

Inscripciones a través del Sistema **SIU-Guarani3**

<http://www.exa.unne.edu.ar/postgrado/1/index.php?tabla=guarani>

Secretaría de Investigación y Posgrado - FaCENA –  
2° Piso Edificio Central - Av. Libertad 5400 - Campus  
Tel: 0379 - 4473931 – int. 118  
Contacto: Lic. Angel E. Barrios Ruiz  
[sip.cursos@comunidad.unne.edu.ar](mailto:sip.cursos@comunidad.unne.edu.ar)