



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

Profesores:

DR. GOICOECHEA, Héctor Casimiro, Profesor visitante (Profesor Titular DE)

Dra. Gabriela Myriam Cabrera, Profesora Asociada DE, Doctora en Ciencias Químicas

Carga horaria total: 40 horas

Clases teóricas: 15 horas

Clases Problemas: 20 horas

Seminarios: 5 horas

Forma de evaluación: 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.

Puntaje propuesto para doctorado: 2 puntos

PROGRAMA ANALÍTICO

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.

Programa analítico

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.

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.; Escalera, 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.; Breitzkreitz, 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.

Actividades prácticas propuestas

Las actividades prácticas del curso consisten en la resolución de problemas con los conocimientos adquiridos en las clases teóricas. Tal ejercitación incluye el planteo de situaciones reales que le permite al y a la estudiante asimilar mejor los contenidos y entender su propósito. Las clases son interactivas y se intercalan partes teóricas y prácticas durante todo el curso.

Las clases teóricas y prácticas están a cargo del profesor del curso. En las clases prácticas se induce al estudiante a proponer y participar de un debate académico sobre el problema propuesto para razonar conjuntamente la mejor solución.