



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado.

"2018 - AÑO DEL CENTENARIO DE LA REFORMA UNIVERSITARIA"

ES COPIA
OSCAR GUILLELMO SEGURA
Director de Despacho
UNSL

SAN LUIS, - 9 OCT. 2018

VISTO:

El Expediente EXP-USL: 10837/2018 mediante el cual se solicita la protocolización del Curso de Posgrado: **QUIMIOMETRÍA: MÉTODOS DE CALIBRACIÓN UNI Y MULTIVARIADA**; y

CONSIDERANDO:

Que el Curso de Posgrado se dicta en el ámbito de la Facultad de Química Bioquímica y Farmacia del 26 de octubre al 3 de noviembre de 2018, con un crédito horario de 40 horas presenciales y bajo la coordinación del Dr. Luis Ariel ESCUDERO.

Que la Comisión Asesora de Posgrado de la Facultad Bioquímica y Farmacia recomienda aprobar el curso de referencia.

Que el Consejo de Posgrado de la Universidad Nacional de San Luis en su reunión del 18 de septiembre de 2018, analizó la propuesta y observa que el programa del curso, bibliografía, metodología de evaluación y docentes a cargo, constituyen una propuesta de formación de posgrado de calidad en su campo específico de estudio.

Que, por lo expuesto, el Consejo de Posgrado aprueba la propuesta como Curso de Posgrado, según lo establecido en Ordenanza CS N° 35/16.

Que corresponde su protocolización.

Por ello y en uso de sus atribuciones

EL RECTOR DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN LUIS

RESUELVE:

ARTÍCULO 1º.- Protocolizar el dictado del Curso de Posgrado: **QUIMIOMETRÍA: MÉTODOS DE CALIBRACIÓN UNI Y MULTIVARIADA**, en el ámbito de la Facultad de Ciencias Química, Bioquímica y Farmacia del 26 de octubre al 3 de noviembre de 2018, con un crédito horario de 40 horas presenciales.

ARTÍCULO 2º.- Protocolizar el cuerpo docente constituido por: el Responsable del curso Dr. Alejandro César OLIVIERI (DNI N° 12.522.179) de la Universidad Nacional de Rosario y Colaborador Dr. Luis Ariel ESCUDERO (DNI N° 31.401.957) de la Universidad Nacional de San Luis.

ARTÍCULO 3º.- Aprobar el programa del Curso de referencia, de acuerdo al **ANEXO** de la presente disposición.-

ARTÍCULO 4º.- Comuníquese, insértese en el Libro de Resoluciones, publíquese en el Digesto Electrónico de la UNSL y archívese.-

RESOLUCIÓN R N°

1483

mss

Dra. Nora Keyes
Secretaria de Posgrado
UNSL

Dr. Félix Nieto Quintas
Rector
UNSL



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

"2018 - AÑO DEL CENTENARIO DE LA REFORMA UNIVERSITARIA"

ES COPIA
OSCAR GUILLEMO SEGURA
Director de Despacho
UNSL

ANEXO

IDENTIFICACIÓN DEL CURSO

UNIDAD ACADÉMICA RESPONSABLE: Facultad de Química Bioquímica y Farmacia.

DENOMINACIÓN DEL CURSO: QUIMIOMETRÍA: MÉTODOS DE CALIBRACIÓN UNI Y MULTIVARIADA

CATEGORIZACIÓN: Perfeccionamiento

FECHA DE DICTADO DEL CURSO: del 26 octubre al 3 de noviembre de 2018

MODALIDAD DE DICTADO: Presencial

CRÉDITO HORARIO TOTAL: 40 horas (20 hs. teóricas y 20 hs. de prácticas de aula)

COORDINADOR: Dr. Luis Ariel ESCUDERO (DNI N° 31.401.957)

EQUIPO DOCENTE

RESPONSABLE: Dr. Alejandro César OLIVIERI

COLABORADOR: Dr. Luis Ariel ESCUDERO

PROGRAMA ANALÍTICO

FUNDAMENTACIÓN:

En el análisis químico asumimos que la propiedad de interés en una muestra (concentración de un analito,...) está relacionada con los valores proporcionados por la técnica que se ha utilizado para analizar dicha muestra. A veces sólo se compara el valor proporcionado por la técnica de análisis con valores previamente medidos o se buscan cambios relativos en los datos. Sin embargo, lo más habitual cuando se utiliza una técnica instrumental en análisis cuantitativo es calcular un modelo matemático, la recta de calibración, que permite predecir la propiedad de interés a partir de una medida instrumental (absorbancia, área de pico cromatográfico, diferencia de potencial,...). Cuando se requiere analizar varios analitos se aplica la calibración multivariante. Su objetivo es predecir la propiedad de interés a partir de múltiples medidas instrumentales. Sus ventajas frente a la recta de calibración son: (1) permiten cuantificar a partir de medidas no selectivas (es decir, en presencia de interferencias) y (2) es posible detectar muestras discrepantes en predicción. Estos modelos son especialmente útiles para el análisis cuantitativo mediante técnicas espectroscópicas. Medir un espectro es una forma rápida y simple de generar varios cientos de medidas. La calibración multivariante permite cuantificar a partir de ellas y mejorar la velocidad de análisis. Queda claro, pero, que estas ideas se pueden aplicar a otras propiedades de interés y a otro tipo de respuestas instrumentales.

OBJETIVOS:

Adquirir o profundizar conocimientos de Quimiometría. Proveer un panorama actualizado de algunas técnicas quimiométricas empleadas en química analítica. Se incluyen calibración univariada, comparación de métodos analíticos y calibración multivariada mediante regresión por cuadrados mínimos clásicos y componentes principales

Cpde RESOLUCIÓN R N° 1483

F. Escudero
Dr. F. Escudero
Rector
UNSL

Oscar Segura
Dr. Oscar Segura
Secretaría de Posgrado
UNSL



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

"2018 - AÑO DEL CENTENARIO DE LA REFORMA UNIVERSITARIA"

ES COPIA
OSCAR GUILLEMO SEGURA
Director de Despacho
UNSL

CONTENIDOS MÍNIMOS:

Calibración univariada, cifras de mérito, comparación de métodos analíticos. Regresión simple, ponderada y bivariada. Calibración multivariada, componentes principales, regresión de cuadrados mínimos parciales. Tópicos avanzados, redes neuronales artificiales

PROGRAMA DETALLADO:

1. Regresión lineal. Calibración univariada. Parámetros de la regresión. Cifras de mérito: sensibilidad, límite de detección, límite de cuantificación. Rangos dinámico y lineal. Exactitud y comparación de métodos analíticos. Región elíptica de confianza conjunta para los parámetros de la regresión. Regresión ponderada. Regresión bivariada.
2. Calibración multivariada de primer orden. Regresión por cuadrados mínimos clásicos (CLS). Regresión por cuadrados mínimos inversos (ILS). Aplicaciones analíticas. Ventajas y desventajas.
3. Calibración multivariada de primer orden. Regresión en componentes principales (PCR). Reducción de la dimensionalidad. Componentes principales, estimación del número óptimo de componentes. Regresión en cuadrados mínimos parciales (PLS). Variables latentes. Estimación del número óptimo de variables. Aplicaciones analíticas. Ventajas y desventajas.
4. Tópicos avanzados. PLS-1 y PLS-2. Redes neuronales artificiales. Pre-procesamiento matemático de espectros.

SISTEMA DE EVALUACIÓN:

La evaluación final consistirá en un examen individual que realizara a distancia. Se pretende que el alumno aplique los conceptos aprendidos a la resolución de problemas tipo.

BIBLIOGRAFÍA:

Libros

1. Massart, DJ, Vandeginste, BMG, Buydens, LMC, De Jong, S, Lewi, PJ, Smeyers-Verbeke, J, Handbook of Chemometrics and Qualimetrics: A and B, Elsevier, Amsterdam, 1997.
2. Martens, H, Naes, T. Multivariate Calibration, Wiley, Chichester, Inglaterra, 1980.
3. Goicoechea, HC, Olivieri, AC, La calibración en Química Analítica, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, 2008.

Artículos

4. Danzer, K, Currie, LA, Guidelines for calibration in analytical chemistry. Part 1. Fundamentals and single component calibration, Pure & Appl. Chem. 1998, 70, 993-1014.
5. Booksh, KS, Kowalski, BR, Theory of analytical chemistry, Anal. Chem. 1994, 66, 782A-791A.
6. Thomas, EV, Haaland, DM, Partial least-squares methods for spectral analyses. 1. Relation to other quantitative calibration methods and the extraction of qualitative information, Anal. Chem. 1988, 60, 1193-1202.
7. Olivieri, AC, Faber, NM, Ferré, J, Boqué, R, Kalivas, JH, Mark, H, Uncertainty estimation in spectroscopic multivariate calibration, Pure & Appl. Chem. 2006, 78, 633-661.

Edilberto Nieto Quintan
Rector
UNSL

Nora Reyes
Secretaría de Posgrado
UNSL

Cpde RESOLUCIÓN R N° 1483



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

ES COPIA
OSCAR GUILLERMO SEGURA
Director de Despecho
UNSL

CARACTERÍSTICAS DEL CURSO

DESTINATARIOS Y REQUISITOS DE INSCRIPCIÓN: Egresados con título de grado universitario de 4 años o más en disciplinas afines a la temática del curso. Estudiantes de posgrado y profesionales con interés en adquirir o profundizar conocimientos de Quimiometría.

CUPO: 25 personas.

PROCESO DE ADMISIÓN: que los inscriptos cumplan con la normativa vigente para cursos de posgrado

CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES:

26 de octubre de 2018: dictado temas 1 y 2. Carga de Software

27 de octubre: dictado temas 3 y 4. Ejemplos y trabajos prácticos

1 de noviembre: Dictado Tema 4. Ejemplos, aplicaciones y trabajo práctico

2 de noviembre: Aplicaciones y análisis de tópicos avanzados. Trabajo Práctico

3 de noviembre: Finalización de los trabajos prácticos, consulta y examen del curso.

LUGAR DE DICTADO: Campus Universitario de la Universidad de San Luis

FECHA PREVISTA PARA ELEVAR LA NÓMINA DE ALUMNOS APROBADOS: noviembre de 2018

FINANCIAMIENTO DEL CURSO

COSTOS: honorarios, traslado y viáticos

FUENTES DE FINANCIAMIENTO: se autofinanciará con los aranceles del curso y el Proyecto de Investigación del Área de Química Analítica

ARANCEL GENERAL: \$1000 (pesos un mil).

BECA AL DOCENTE DE LA UNSL: se realizará un 30 % de descuento por lo que el arancel final sería de \$ 700 (pesos setecientos)

BECA AL ALUMNO DE LA UNSL: se realizará un 30 % de descuento por lo que el arancel final sería de \$ 700 (pesos setecientos)

Cpde RESOLUCIÓN R N°
mss

1483

Dra. Nora Reyes
Secretaría de Posgrado
UNSL

Dr. Félix D. Nieto Quintas
Rector
UNSL