

QUIMIOMETRÍA: CALIBRACIÓN MULTIVARIADA DE SEGUNDO ORDEN

Programa

1. Introducción. Calibraciones con datos de diferentes órdenes. Ventajas analíticas. Generación de datos de segundo orden. Aplicaciones analíticas con diferentes técnicas instrumentales.
2. Modelos quimiométricos para datos de segundo orden. Relación entre modelo y estructura de los datos. Organización de los datos para su procesamiento.
3. Análisis paralelo de factores (PARAFAC). La propiedad de unicidad. Estimación del número de componentes. Efecto de las restricciones e inicialización. Calibración pseudo-univariada. Aplicaciones.
4. Resolución multivariada de curvas mediante cuadrados mínimos alternantes (MCR-ALS). Estimación del número de componentes. Restricciones y su efecto en la resolución. Calibración pseudo-univariada. Ambigüedad rotacional y sus consecuencias. Aplicaciones.
5. Cuadrados mínimos parciales desdoblados y multi-dimensionales (U-PLS y N-PLS). Bilinealización residual (RBL). Estimación del número óptimo de variables latentes y de componentes residuales. Aplicaciones.
6. Interfaz gráfica de MATLAB para procesamiento de segundo orden. Descarga e instalación del software. Ejemplos prácticos.

Desarrollo

Clases teóricas, de resolución de problemas y manejo de software para calibración multivariada de segundo orden. Este último es de libre acceso y no requiere de ningún entorno especializado para ser ejecutado.

Bibliografía

Libros

1. Smilde, A.; Bro, R.; Geladi, P. *Multiway Analysis with Applications in the Chemical Sciences*, John Wiley & Sons, West Sussex, UK, 2004.
2. Olivieri, AC, Escandar, GM, *Practical three-way calibration.*, Elsevier, Amsterdam, 2014, ISBN 978-0-12-410408-2.

Artículos

1. Bro, R. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **1997**, 38, 149-171.
3. Öhman, J.; Geladi, P.; Wold, S. *J. Chemometrics* **1990**, 4, 79-90.
4. Olivieri, A. C. *J. Chemometrics* **2005**, 19, 253-265.
5. Tauler, R. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **1995**, 30, 133-146.
6. Olivieri, A.C., Wu, H.L., & Yu, R.Q. (2009) *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **96**, 246–251.