

QUIMIOMETRÍA: MÉTODOS DE CALIBRACIÓN UNI- Y MULTIVARIADA

Información general

FECHA: 11 al 15 diciembre de 2017

LUGAR: Facultad de Ciencias Exactas. Universidad Nacional de La Plata. Calle 47 y 115, La Plata. Argentina.

CARGA HORARIA: 30 horas

ARANCEL: sin costo

INFORMACIÓN E INSCRIPCIÓN: lidma@exactas.unlp.edu.ar.

RESPONSABLE DEL CURSO: Alejandro C. Olivieri. IQUIR-UNR

COORDINADORES:

Cecilia Castells: castells@isis.unlp.edu.ar;

Juan Padro: juanmpadro@quimica.unlp.edu.ar

Programa

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. PCR vs. PLS-1 y PLS-2. Redes neuronales artificiales. Selección de variables. Pre-procesamiento matemático de espectros. Comparación de métodos mediante pruebas de aleatorización.
5. Introducción a la calibración multi-vía o de orden superior. Tipos de datos y algoritmos de procesamiento: PARAFAC, MCR-ALS, PLS/RBL. La ventaja de segundo orden. Ejemplos de aplicación.

Desarrollo

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

Bibliografía

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.
4. Olivieri, AC, Escandar, GM, Practical three-way calibration., Elsevier, Amsterdam, 2014, ISBN 978-0-12-410408-2.

Artículos

5. Danzer, K, Currie, LA, Guidelines for calibration in analytical chemistry. Part 1. Fundamentals and single component calibration, Pure & Appl. Chem. 1998, 70, 993-1014.
6. Booksh, KS, Kowalski, BR, Theory of analytical chemistry, Anal. Chem. 1994, 66, 782A-791A.
7. 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.
8. 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.