

---

Chacras de Coria, 3 de julio de 2020

M. Sc. Ing. Agr. Rodrigo López Plantey  
Secretario de Ciencia y Técnica  
Facultad de Ciencias Agrarias  
UNCuyo

S \_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ D

De mi mayor consideración

Me dirijo a Ud. y por su intermedio a quien corresponda a fin de solicitar el aval por parte de la Facultad de Ciencias Agrarias para el curso de post-grado "**Introducción a Matlab y Clasificación Multivariante**". El mismo será dictado por los docentes: Dr. José M. Amigo (Universidad del País Vasco, Bilbao, España), la Dra. Silvana M. Azcarate (Universidad Nacional de La Pampa, Santa Rosa, Argentina) y el Dr. Héctor Goicoechea (Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina). Dicho curso es organizado por el Grupo de Química Analítica Verde (GQAV) del Instituto de Biología Agrícola de Mendoza - FCA UNCuyo.

Por intermedio de la presente se eleva la propuesta del mismo detallando contenidos, modalidad de cursado, duración, sistema de evaluación y otras características generales del mismo.

Sin otro particular, saludo a Ud. atentamente.

---

**Dr. Federico J. V. Gomez**  
Grupo de Química Analítica Verde  
Cátedra Qca. Orgánica y Biológica  
IBAM - FCA UNCuyo - CONICET

---

### **Información del Curso Propuesto**

**1) Denominación del curso: "Introducción a Matlab y Clasificación Multivariante".**

**2) Docentes Responsables:**

**Dr. José M. Amigo**, Profesor Distinguido del Departamento de Química Analítica de la Universidad del País Vasco (UPV-EHU), Bilbao, España.

**Dra. Silvana M. Azcarate**, Investigadora Asistente CONICET, JTP Qca. Analítica y Avanzada. Instituto de las Ciencias de la Tierra y Ambientales de La Pampa (INCITAP), Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de La Pampa (UNLPam).

**Dr. Héctor C. Goicoechea**, Profesor Titular de la Cátedra de Química Analítica I - Investigador Superior de CONICET - Laboratorio de Desarrollo Analítico y Quimiometría (LADAQ), Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, Universidad Nacional del Litoral (UNL).

**3) Coordinador: Dr. Federico J. V. Gomez**, Investigador Asistente CONICET- Aux. 1ª Qca. Orgánica y Biológica. Grupo de Química Analítica Verde (GQAV) - Instituto Biología Agrícola de Mendoza (IBAM) - Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad Nacional de Cuyo, CONICET.

**4) Contenido del Curso:**

**Fundamentos:**

La Química Analítica tiene en la estadística una de sus herramientas fundamentales. Esta imprescindible relación ha dado lugar en los últimos años al desarrollo de la Quimiometría, una disciplina que aplica las técnicas matemáticas de la estadística a los problemas analíticos de la identificación y cuantificación de las sustancias químicas, siendo habitual el uso de la quimiometría en cualquier análisis químico. En la actualidad, esta disciplina ha ganado importancia debido sobre todo por cantidad de información que obtenemos a través de los equipos instrumentales (los cuales generan una gran cantidad de datos numéricos) y por el incremento en la capacidad de cálculo de los ordenadores actuales. Muchos de los problemas químicos y aplicaciones de la qui-

---

miometría implican desarrollar un modelo matemático capaz de clasificar las muestras de acuerdo a alguna propiedad específica. Las técnicas de clasificación implican un conjunto de herramientas que permiten establecer agrupaciones de muestras en función de características comunes o relaciones que existan entre ellas o bien definir criterios para clasificar muestras desconocidas. En este curso se abordará una visión general de las técnicas de clasificación más ampliamente utilizadas. La exposición mantendrá un cierto criterio matemático, compensado con una clara orientación aplicada. Todas las técnicas se ilustrarán con ejemplos, que justifican su aplicabilidad.

### **Objetivos:**

- Conseguir que los alumnos sean capaces de afrontar un problema determinado a través de una serie de pasos coordinados: análisis del problema, planificación de los experimentos, análisis de los datos, aplicación de métodos de clasificación y/o regresión.
- Transmitir una visión global del conjunto de estrategias quimiométricas disponibles y de las relaciones existentes entre los distintos procedimientos, de manera que los fundamentos sobre quimiometría adquiridos durante este curso puedan ser aplicados cuando sea necesario en la actividad específica que cada alumno desempeñe.
- Dejar patente el gran número de aplicaciones prácticas de la quimiometría, más allá de aquellas de carácter estrictamente químico, de manera que los alumnos sean conscientes de la enorme utilidad de las nociones que han adquirido.
- Permitir a los alumnos familiarizarse con la utilización de un completo software quimiométrico, de forma que puedan emplearlo en futuras aplicaciones propias.

### **Contenidos**

#### **Bloque 1: Introducción a MATLAB**

En este bloque se mostrará la base del software Matlab para el análisis de datos que se desarrollará en el bloque 2.

**Sesión 1.** Estructura de Matlab. Matrices y vectores. Operaciones básicas.

**Sesión 2.** Introducción a las salidas gráficas (graphical outputs).

**Sesión 3.** Flow control

**Sesión 4.** Gestión de datos y resultados

---

## **Bloque 2: Clasificación multivariante**

Este bloque se desarrollará la teoría y la práctica de las herramientas quimiométricas más aplicadas en el campo de la clasificación. Se desarrollarán horas lectivas con ejercicios guiados y sesiones prácticas con casos reales relacionados a tópicos relacionados a la biología molecular, ciencias farmacéuticas, clínicas, forenses, agroalimentos y medioambiente.

**Sesión 1.** Introducción al Machine Learning. Estructura de datos

**Sesión 2.** Análisis exploratorio. Análisis de componentes principales (PCA).

**Sesión 3.** Preprocesado de datos

**Sesión 4.** Regresión Multivariante: MLR, PCR, PLS.

**Sesión 5.** Distancias y similitud. Clustering. Dendrogramas. K-Means. Fuzzy C-means (FCM).

**Sesión 6.** k-Nearest Neighbor (KNN)

**Sesión 7.** Single class modelling. SIMCA

**Sesión 8.** Linear and quadratic discriminant analysis (LDA/QDA)

**Sesión 9.** Partial least square discriminant analysis (PLS-DA)

**Sesión 10.** Breve introducción a SVM y ANN

**5) Modalidad:** Presencial.

**6) Carga horaria: Bloque 1:** 20 horas. **Bloque 2:** 40 horas.

**7) Fecha:** Del 9 al 18 de diciembre de 2020.

**8) Cupo:** 25 alumnos.

**9) Profesionales a los que está orientado:** Ing. Agrónomos, Ing. y Lic. en Química, Ing. y Lic. en Biología, Médicos, Bioquímicos y carreras afines.

**10) Modo de evaluación:** Al finalizar el curso, los alumnos deberán realizar un cuestionario con casos prácticos a resolver utilizando los conceptos, programas y algoritmos analizados en el curso. Los alumnos deberán entregar los problemas resueltos 15 días después de finalizado el curso.

**11) Lugar de realización del curso:** Instituto de Biología Agrícola de Mendoza (IBAM)- Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad Nacional de Cuyo, CONICET.

**ACLARACIÓN:** Los alumnos con suficiente conocimiento de Matlab podrán no asistir al bloque 1 de Introducción a Matlab. El uso que se hará de Matlab durante todo el resto del curso es muy secundario, sirviendo sólo como plataforma para visualizar los

---

datos y como plataforma para usar la PLS\_Toolbox. La PLS\_Toolbox es la herramienta que se usará durante el curso. Durante el curso, se dará acceso gratuito a todos los estudiantes. Indicaciones de como instalarla se darán en su debido momento.