



Curso de posgrado – Doctorado en Ciencias Biológicas

## Tópicos de Quimiometría: metodología de la superficie de respuesta y clasificación

**Docentes:** Dr. Héctor C. Goicoechea, Dra. Carla M. Teglia y Dra. María Julia Culzoni.

**Docente invitada:** Dra. Silvana Azcarate. Laboratorio de Desarrollo Analítico y Quimiometría (LADAQ), Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina. Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET).

### 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.
- 2) Comprender los principios de los métodos de clasificación y su aplicación a la solución de problemas en diferentes campos de la ciencia.

**Perfil de los alumnos a quienes está orientado el curso:** Alumnos de doctorado y avanzados en estudios de grado de carreras de ciencias experimentales.

**Fecha:** 18 al 22 de febrero de 2019.

**Carga horaria:** 30 horas intensivas a dictar en 5 días consecutivos.

**Número de vacantes:** 40.

### Programa Analítico teórico y práctico

#### Tema 1: Metodología de superficie de respuesta

- 1.1. Repaso de conceptos estadísticos y de análisis de factores.
- 1.2. Introducción a la metodología de análisis de 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. Análisis de gráficas de superficie y de contorno. Intervalo de confianza de las predicciones.

1.3. Datos no normales. Uso de transformaciones de la respuesta o modelado con redes neuronales para modelos complejos implícitos o que no siguen los supuestos de la normalidad.

1.4. Respuestas múltiples. Análisis de factores en sistemas con varias respuestas. Optimización de sistemas con varias respuestas y factores que requieran condiciones especiales. Superposición de gráficas de contorno. Función deseabilidad.

1.5. Parte práctica. Uso del programa Design Expert. Uso del programa SRO\_ANN, una interfaz gráfica escrita en Matlab.

### Tema 2: Estudio de casos reales proporcionados por los alumnos

Análisis de sistemas experimentales. Estudio de factores a analizar. Descripción de los diseños y la metodología para su desarrollo. Planificación experimental.

### 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. Parte práctica. Análisis de artículos científicos y discusión de los resultados. Uso de rutinas de Matlab para implementar modelos de clasificación.

### Bibliografía

- 1) RH Myers, 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, Scarmínio, I S, Bruns R E. 2001. Como fazer experimentos. Livro Texto UNICAMP, Campinas.
- 5) Gutiérrez 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 Candioti, L, De Zan MM, Cámara, 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.; Escaleira, 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) B. Dejaegher, Y. Vander Heyden. Experimental designs and their recent advances in set-up, data interpretation, and analytical applications. J. Pharm. Biomed. Anal. 56 (2011) 141- 158.
- 12) L Vera-Candioti, M Cámara, MM De Zan, H Goicoechea. Experimental design and multiple response optimization. Using the desirability function in analytical methods development. Talanta 124 (2014) 123-138.

- 13) P.C. Giordano, H.C. Goicoechea, A.C. Olivieri, SRO\_ANN: An integrated MatLab toolbox for multiple surface response optimization using radial basis functions. Chemom. Intell. Laborat. Syst. 171 (2017) 198–206.
- 14) D. Ballabio, V. Consonni, Classification tools in chemistry. Part 1: linear models. PLS-DA, Anal. Methods 5 2013 ( ) 3790-3798.
- 15) S. Azcarate, A. de Araujo, A. Muñoz de la Peña, H.C. Goicoechea, Modeling second-order data for classification issues: data characteristics, algorithms, processing procedures and applications, Trends Anal. Chem. (TRAC) 107(2018) 151-169.
- 16) Experimental Design, Héctor Goicoechea, Chapter 10 in “Fingerprinting Techniques in Food Authentication and Traceability” (2018). Editors: Leo Nollet and Khwaja Siddiqi. CRC Press, New York.

#### Método de evaluación y promoción del Curso.

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.