

SANTA FE, 27 de noviembre de 2025.

VISTO las presentes actuaciones vinculadas con la propuesta de Curso de Posgrado “Tópicos de quimiometría: calibración y clasificación multivariada con aplicación en química analítica” para la carrera de Doctorado en Ciencias Biológicas, bajo la dirección del Dr. Héctor Casimiro GOICOECHEA y la coordinación del Dr. Fabricio Alejandro CHIAPPINI, y

CONSIDERANDO:

Que la propuesta se encuadra en el artículo 2º de la Reglamentación vigente de Cursos de la FBCB, aprobada por Resolución CD 1166/19;

Que el Comité Académico de la mencionada carrera procedió a analizar la propuesta como Curso de Formación Específica y sugiere otorgar dos UCAs;

Que se ha expedido favorablemente la Secretaría de Posgrado, y

TENIENDO EN CUENTA el dictamen de la Comisión de Interpretación y Reglamentos y de la Comisión de Ciencia y Técnica y de Extensión, aprobados en sesión ordinaria del día de la fecha,

**EL CONSEJO DIRECTIVO
DE LA FACULTAD DE BIOQUÍMICA Y CIENCIAS BIOLÓGICAS
RESUELVE:**

ARTÍCULO 1º.- Aprobar el Curso de Posgrado “Tópicos de quimiometría: calibración y clasificación multivariada con aplicación en química analítica” para la carrera de Doctorado en Ciencias Biológicas, bajo la dirección del Dr. Héctor Casimiro GOICOECHEA y la coordinación del Dr. Fabricio Alejandro CHIAPPINI, como Curso de Formación Específica, con el reconocimiento de dos UCAs, que como anexo forma parte de la presente.

ARTÍCULO 2º.- Inscribase, comuníquese por Secretaría Administrativa, hágase saber por correo electrónico a Oficina de Comunicación Institucional. Cumplido, pase a la Secretaría de Posgrado para notificación a los interesados y demás efectos que correspondan.

RESOLUCIÓN CD N°: 1017

PROPUESTA DE CURSO DE POSGRADO EN EL MARCO DEL DCB - FBCB

1.- DENOMINACIÓN:

Curso de posgrado en el marco del Doctorado en Cs. Biológicas, teórico-práctico

2.- NOMBRE:

Tópicos de quimiometría: calibración y clasificación multivariada con aplicación en química analítica

3.- DIRECTOR:

Dr. Héctor Goicoechea

4.- COORDINADOR:

Dr. Fabricio Chiappini

5.- DOCENTES:

- Dra. Silvana Azcárate (Universidad Nacional de La Pampa, UNLPam - CONICET)
- Dr. Adriano Araujo Gomes (Universidade Federal do Rio Grande do Sul, UFRGS – Porto Alegre, Brasil)
- Dr. Héctor Goicoechea (FBCB-UNL)
- Dr. Fabricio Chiappini (FBCB-UNL)

6.- OBJETIVOS:

6.1.- Generales

Brindar a los estudiantes de posgrado una formación teórico-práctica sólida en los fundamentos básicos y aplicaciones de la quimiometría, orientada al desarrollo, validación y evaluación de métodos analíticos multivariados de calibración y clasificación. El curso busca integrar conceptos estadísticos y químicos, promoviendo la comprensión de las relaciones entre los datos experimentales y las propiedades analíticas, así como la capacidad de implementar herramientas quimiométricas en contextos reales de investigación.

6.2.- Específicos

- Conocer los fundamentos básicos de los métodos quimiométricos de calibración y clasificación de uso frecuente en química analítica
- Desarrollar la capacidad de interpretar y visualizar datos químicos multivariados, mediante la exploración cualitativa y cuantitativa de espectros y otras señales analíticas, utilizando herramientas computacionales
- Comprender y aplicar criterios quimiométricos para la selección, validación y diagnóstico de modelos, evaluando su desempeño y robustez con base en métricas de ajuste, predicción e incertidumbre
- Iniciarse en el manejo de software específico para llevar a cabo el tratamiento de datos
- Aplicar los conocimientos adquiridos a la resolución de problemas de aplicación en áreas afines a las ciencias exactas y naturales

7.- PERFIL DE LOS ALUMNOS:

Alumnos del Doctorado en Ciencias Biológicas. También se aceptarán alumnos de otras carreras de posgrado en las diversas ciencias experimentales.

8.- REQUISITOS DE FORMACIÓN PREVIA DE LOS INSCRIPTOS:

Graduados en las carreras de Bioquímica, Licenciaturas en Biotecnología, Licenciatura en Química, Ingeniería Química, Ingeniería Agronómica, Veterinaria y otras carreras relacionadas. Formación básica de química analítica, estadística y álgebra.

9.- FECHA TENTATIVA DE INICIO:

Mayo-Junio de 2026.

10.- MODALIDAD, CARGA HORARIA TOTAL Y DISTRIBUCIÓN HORARIA DE LAS ACTIVIDADES:

10.1) Modalidad: presencial

10.2) Carga horaria total: 30 h

10.3) Distribución horaria de las actividades: cursado intensivo, a dictar en 5 días consecutivos.

Cantidad de horas de teoría: 15 h

Cantidad de horas de práctica: 15 h. La parte práctica consistirá en la resolución en computadora y puesta en común de problemas de aplicación, organizados en guías por cada unidad temática.

11.- VACANTES Y CRITERIOS DE SELECCIÓN:

Vacantes fijadas:

- ✓ Mínimo 10
- ✓ Máximo 50

12.- PROGRAMA ANALÍTICO:

Tema 1: Quimiometría. Conceptos básicos. Datos uni- y multivariados. Introducción a la calibración y clasificación multivariadas. Matriz de datos. Dimensión y estructura. Rango. Descomposición matricial. Aprendizaje estadístico supervisado y no supervisado. Modelos: selección y validación. Principio de parsimonia.

Tema 2: Generación de datos químicos experimentales. Calibración metodológica y calibración instrumental. Analito e interferente. Conjuntos de muestras de calibrado (entrenamiento) y validación. Técnicas analíticas instrumentales. Datos espectrales. Preprocesado de datos.

Tema 3: Uso de software. Lenguaje MATLAB. Entorno. Tipos de variables. Creación de arreglos: vectores, matrices y estructuras. Operaciones básicas. Indexación. Ejecución de funciones internas y externas. Ejecución de interfaces gráficas de usuario (GUI). Manipulación de archivos de datos. Carga e importación. Herramientas gráficas.

Tema 4: Calibración univariada (orden cero). Regresión lineal simple. Ajuste por cuadrados mínimos, diagnóstico, inferencia y diagnóstico. Predicción de muestras test. Validación de métodos analíticos. Cifras analíticas de mérito (AFOMs).

Tema 5: Análisis exploratorio multivariado. Reducción de la dimensión. Análisis de componentes principales (PCA). Concepto de variable latente. Variancia explicada. Matrices de loadings y scores. Interpretación gráfica. PCA como insumo para otras técnicas: diagnóstico de valores atípicos, regresión, agrupamiento (*clustering*).

Tema 6: Calibración multivariada de primer orden. Tipos de calibración. Modelos de regresión lineal múltiple (RLM), regresión en componentes principales (PCR) y regresión en cuadrados mínimos parciales (PLS). Selección y validación de modelos. Validación cruzada. Métricas de error. Diagnóstico de outliers X e Y. Selección de variables y preprocesamiento. AFOMs para modelos de primer orden. Ventaja analítica de primer orden. Comparación con calibración univariada. Aplicaciones.

Tema 7: Modelos de clasificación multivariada. Modelado de clases: modelado suave independiente por analogía de clases (SIMCA). Análisis discriminante: lineal (LDA), cuadrático (QDA), por cuadrados mínimos parciales (PLS-DA). Validación de modelos de clasificación. Aplicaciones a sistemas químicos de interés biológico, alimenticio, ambiental.

Tema 8: Selección de variables. Importancia en modelos multivariados. Métodos de filtrado (correlación, intervalos), métodos envolventes (SPA, GA, ACO), métodos basados en modelos (VIP, sMC, selectividad PLS). Interpretación de resultados. Comparación. Validación y criterios de selección.

Distribución de temas y clases:

Encuentro	Tema	Docente
1	Mañana: tema 1 y 2 Tarde: tema 3	Chiappini / Azcarate
2	Mañana: tema 4 Tarde: tema 5	Goicoechea / Chiappini
3	Mañana: tema 6 Tarde: tema 6	Goicoechea / Chiappini
4	Mañana: tema 7 Tarde: tema 7	Azcarate / Araujo
5	Mañana: tema 8 Tarde: tema 8	Araujo / Azcarate

13.- BIBLIOGRAFÍA:

H.C. Goicoechea & A.C. Olivieri, "La Calibración en Química Analítica", (2007). Ed. UNL, Santa Fe, Argentina.

Introduction to multivariate calibration. A practical approach. A. Olivieri (2018). Ed. Springer.
SD Brown (1988) Chemometrics: A textbook. D. L. Massart. B. G. M. Vandeginste, S. N. Deming, Y. Michotte, and L. Kaufman, Elsevier, Amsterdam, 1988. ISBN 0-444-42660-4. Price Dfl 175.00. J Chemom 2 (4):298-299.

AC Olivieri (2014) Analytical Figures of Merit: From Univariate to Multiway Calibration. Chem Rev 114 (10):5358-5378

F. Chiappini, HC Goicoechea, AC Olivieri. "MVC1_GUI: A MATLAB graphical user interface for first-order multivariate calibration. An upgrade including artificial neural networks modelling", , Chemom. Intell. Lab. Syst. 206 (2020) 104162.

D Ballabio, V Consonni (2013) Classification tools in chemistry. Part 1: Linear models. PLS-DA. Anal Methods 5:3790-3798.

M Cocchi, A Biancolillo, F Marini (2018), Chapter Ten - Chemometric Methods for Classification and Feature Selection, En: Comprehensive Analytical Chemistry, (Ed: J Jaumot, C Bedia, R Tauler), Elsevier, p. 265-299.

D Ballabio, F Grisoni, R Todeschini (2018) Multivariate comparison of classification performance measures. Chemom Intell Lab Syst 174:33-44

D Ballabio (2015) A MATLAB toolbox for Principal Component Analysis and unsupervised exploration of data structure. Chemom Intell Lab Syst 149:1-9

M Valcárcel, Á Ríos (1999) A metrological hierarchy for analytical chemistry. TrAC, Trends Anal Chem 18:68-75

R Bro, AK Smilde (2014) Principal component analysis. Anal Methods 6 (9):2812-2831.

Adriano de Araújo Gomes, Silvana M. Azcarate, Paulo Henrique Gonçalves Dias Diniz, David Douglas de Sousa Fernandes, Germano Veras. Variable selection in the chemometric treatment of food data: A tutorial review. Food Chemistry, 2022, 131072. DOI: 10.1016/j.foodchem.2021.131072e

14.- REQUISITOS MÍNIMOS DE ASISTENCIA. MÉTODOS DE EVALUACIÓN Y/O PROMOCIÓN.

Requisito de asistencia: 80% de asistencia como mínimo a todas las clases.

Evaluación: el curso se acredita con la aprobación (60%) de un examen final escrito en donde el estudiante deberá aplicar las técnicas vistas en la resolución de problemas

15.- DEL DERECHO DE INSCRIPCIÓN:

El arancel se fijará al momento de la difusión del curso.

El curso se autofinanciará con SET. Con arancel.