

QUIMIOMETRÍA: CALIBRACIÓN MULTIVARIADA DE PRIMER Y SEGUNDO ORDEN

Programa

1. Calibración multivariada de primer orden. Cuadrados mínimos inversos (ILS). Ventajas y desventajas. Análisis de componentes principales (PCA). Regresión en componentes principales (PCR). Variables latentes. Estimación del número óptimo de variables. Validación cruzada. Coeficientes de regresión. Ventaja de primer orden.
2. Regresión en cuadrados mínimos parciales (PLS). Análisis cuantitativo y análisis discriminante (PLS-DA). Coeficientes de regresión. PLS-1 vs. PLS-2.
3. Desarrollo de calibraciones de primer orden. Selección de longitudes de onda. Pre-procesamiento matemático de espectros.
4. Calibración multivariada de segundo orden. Ventajas analíticas. Generación de datos de segundo orden.
5. Análisis paralelo de factores (PARAFAC). La propiedad de unicidad. Estimación del número de componentes. Efecto de las restricciones e inicialización. Calibración seudo-univariada. Aplicaciones.
6. Resolución multivariada de curvas mediante cuadrados mínimos alternantes (MCR-ALS). Estimación del número de componentes. Restricciones y su efecto en la resolución. Calibración seudo-univariada. Ambigüedad rotacional y sus consecuencias. Aplicaciones.

Desarrollo

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

Bibliografía

Libros

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. Introduction to multivariate calibration. A practical approach. Olivieri, AC, Springer-Nature, Berlín, 2018.
4. Smilde, A.; Bro, R.; Geladi, P. Multiway Analysis with Applications in the Chemical Sciences, John Wiley & Sons, West Sussex, UK, 2004.
5. Olivieri, AC, Escandar, GM, Practical three-way calibration., Elsevier, Waltham, 2014.

Artículos

1. 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.

2. Chiappini, FA, Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2020**, 206, 104162.
1. Bro, R. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **1997**, 38, 149-171.
2. Tauler, R. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **1995**, 30, 133-146.
3. Chiappini, FA, Muñoz de la Peña, A, Goicoechea, HC, Olivieri, AC, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2023**, 237, 104814.