



SALTA, 13 de abril de 2018

EXP-EXA N° 8085/2018

RESCD-EXA N° 122/2018

VISTO la Nota-exa N° 247/18, presentada por la Mag. Lidia PEÑALOZA, mediante la cual propone el dictado del Curso de Posgrado "Análisis de datos multivariados para la calibración en Química Analítica", bajo la dirección del Dr. Héctor Casimiro Goicoechea, en el marco del Proyecto Estratégico de Mejoras de Química (PMQ), Convenio UNSa-SPU-1404/14, y

CONSIDERANDO:

Que el Departamento de Química y el Director General del Proyecto de Mejora en Química, aconsejan autorizar las erogaciones del dictado del curso (fs. 07).

Que se cuenta con despacho favorable de la Comisión de Posgrado (fs. 10), de la Comisión de Docencia e Investigación (fs. 11) y de la Comisión de Hacienda (fs. 12).

Que el curso en cuestión se encuadra en la Res. CS 640/08 (Reglamento de Curso de Posgrado de la Universidad) y en las RESCD-EXA 481/12 (Normativas para el dictado de cursos de posgrado de la Facultad) y RESCD-EXA 017/16.

Por ello, y en uso de las atribuciones que le son propias

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS  
(en sesión ordinaria del día 11/04/18)

RESUELVE

ARTICULO 1º: Autorizar el dictado del Curso de Posgrado "Análisis de datos multivariados para la calibración en Química Analítica", a cargo del Dr. Héctor Casimiro GOICOECHEA y la Coordinación de la Mag. Lidia PEÑALOZA, con las características y requisitos detallados en el Anexo I de la presente resolución.

ARTICULO 2º: Disponer que una vez finalizado el dictado del curso, el docente responsable elevará el listado de los participantes promovidos para la confección de los certificados y/o constancias respectivos, los que serán emitidos por esta Unidad Académica de acuerdo a lo establecido en la reglamentación vigente (Res-CS-640/08).

ARTICULO 3º: Dejar aclarado que la presente resolución no acredita la concreción del curso; para ello el director responsable del mismo deberá elevar el informe final de realización correspondiente, con los detalles que el caso amerite, dentro de los 8 (ocho) meses desde la finalización del dictado. En caso de que el curso no se pudiera dictar, el docente responsable deberá informar tal situación, dentro de los 30 (treinta) días de la fecha prevista para su inicio.

///...

*[Handwritten signature]*



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Av. Bolívar 5150 - 4000 - Salta

Tel. 0387/423-3400 - Fax 0387/423-3440

República Argentina

...///-2-

RESCD-EXA N° 122/2018

ARTICULO 4°: Imputar el monto de \$6500 (PESOS SEIS MIL QUINIENTOS) en conceptos de traslado y estadía del Dr. GOICOECHEA, a la partida presupuestaria del Proyecto Estratégico de Mejora de Química (PMQ), Convenio UNSa-SPU 1404/14, actividad C.1.1.10 (3° año). Imputar del Departamento de Química el monto de \$500 (PESOS QUINIENTOS) como contrapartida del PMQ.

Establecer que la diferencia de erogaciones que pudieran surgir serán cubiertos por el arancel del curso o los fondos propios del Departamento de Química.

ARTICULO 5°: Hágase saber al Dr. Héctor Casimiro GOICOECHEA, a la Mag. Lidia PEÑALOZA (Coordinadora del curso), al Ing. Norberto Alejandro Bonini (Director Gral. del Proyecto de Mejoras de Química), al Departamento de Química, al Departamento de Informática y al Departamento Adm. de Posgrado. Cumplido, resérvese.

mxs  
rer

  
Dra. MARÍA RITA MARTEARENA  
SECRETARÍA ACADÉMICA Y DE INVESTIGACIÓN  
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa.



  
Dr. JORGE FERNANDO YAZLLE  
DECANO  
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa.



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta

Tel. (0387) 425-5408 • Fax (0387) 425-5449

República Argentina

**ANEXO I DE LA RESCD-EXA: 122/2018 EXP-EXA: 8085/2018**

**Curso de Posgrado:** *“Análisis de datos multivariados para la calibración en Química Analítica”*.

**Director del curso:** Dr. Héctor Casimiro GOICOECHEA

**Coordinadora:** Mag. Lidia PEÑALOZA

**Fines y objetivos:** Brindar a los participantes aprendizajes significativos y actualizados sobre calibración metodológica, abarcando conceptos que van desde calibración univariada hasta calibración de orden superior.

**Carga horaria:** 45 horas totales

**Distribución horaria:**

- 30 horas de clases teóricas (presencial)
- 10 horas de estudio previo y obligatorio de bibliografía (no presencial)
- 5 horas de evaluación (presencial)

**Metodología:** Las instancias teóricas presenciales consistirán en clases magistrales. Cada participante deberá disponer de una computadora personal, en las cuales se realizarán las actividades prácticas. Se brindarán horarios de consulta presenciales y a distancia a través de la página web perteneciente al Laboratorio de Desarrollo Analítico y Quimiometría (LADAQ), Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, Universidad Nacional del Litoral.

**Sistema de evaluación:** Se requiere una asistencia del 80%. El último día del curso los alumnos deberán realizar un examen escrito sobre los contenidos básicos dictados en el curso y la resolución de un problema.

**Lugar de realización:** Aula de Seminario de Química (Departamento de Química) y Laboratorio de Informática (Departamento de Informática) de la Facultad de Ciencias Exactas Universidad Nacional de Salta. Avenida Bolivia 5150. Salta.

**Fecha de dictado:** Clases teóricas y prácticas presenciales: 11 al 17 de mayo de 2018.

**Conocimientos previos necesarios:** Fundamentos de química analítica instrumental, estadística descriptiva y manejo de planillas de cálculo.

**Profesionales a los que está dirigido el curso:** Docentes, doctorandos y estudiantes avanzados de carreras de grado dependientes de la Facultad de Ciencias Exactas, docentes y doctorandos de otras unidades académicas de esta y otras universidades, y profesionales del medio.

**Carrera de posgrado a los que está dirigido el curso:** Doctorado en Ciencias, Áreas Química Aplicada y Energías Renovables, Maestrías y Especialidades dependientes de esta Facultad. Se aceptarán alumnos avanzados de las carreras del Departamento de Química, previa presentación del estado curricular particular.

///...

*Handwritten signature and initials in blue ink.*



## ANEXO I DE LA RESCD-EXA: 122/2018 EXP-EXA: 8085/2018

### Detalle analítico de erogaciones:

- Pasaje aéreo ida y vuelta Santa Fe – Buenos Aires – Salta.
- Viáticos externos a la provincias NOA correspondientes a Profesor Titular, 9 días
- Fotocopias
- Insumos de informática
- Servicio de café

### Arancel:

- Docentes, doctorandos y estudiantes avanzados de carreras de grado del Departamento de Química de la Facultad de Ciencias Exactas: sin cargo
- Docentes de otras unidades académicas de esta y otras universidades: \$ 1.500 (PESOS UN MIL QUINIENTOS)
- Doctorandos de otras unidades académicas de esta y otras universidades: \$ 900 (PESOS NOVECIENTOS)
- Profesionales del medio: \$ 2.500 (PESOS DOS MIL QUINIENTOS)

**Certificación:** Se entregarán certificados de aprobación a los participantes que hayan cumplido con las exigencias de la evaluación. Los que sólo asistan a la teoría recibirán una constancia de asistencia. Los certificados estarán a cargo de la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de Salta.

**Cupo:** 35 personas, con prioridad para docentes, doctorandos y estudiantes avanzados de carreras de grado del Departamento de Química de la Facultad de Ciencias Exactas.

### Programa Analítico del curso

#### Tema 1. Introducción

Calibración metodológica e instrumental. Estructura de datos uni- y multivariados. Generación de datos multivariados. Ventajas en la calibración proporcionadas por el aumento en el número de vías.

**Tema 2:** Revisión de conceptos estadísticos. Hipótesis estadísticas. Comparación de dos series independientes, comparación de dos variancias, comparación de dos series apareadas, ANOVA de un factor. Uso del programa Excel para solución de problemas.

#### Tema 3. Calibración univariada

Obtención de datos de calidad analítica para lograr una correcta calibración. Ajuste por cuadrados mínimos ordinario, ponderado y bilineal. Estudio de linealidad. Cifras de mérito. Uso de programas informáticos para análisis estadísticos. Uso de interfaz gráfica Univar escrita en Matlab.

#### Tema 4. Calibración multivariada de primer orden

Calibración multivariada de primer orden. Determinación de dos analitos por análisis con dos sensores. Análisis con múltiples sensores. Cuadrados mínimos clásicos (CLS). Cuadrados mínimos inversos (ILS). Regresión en componentes principales (PCR). Cuadrados mínimos parciales (PLS). Uso de rutinas escritas en Matlab y de la interfaz gráfica MVC1.

*Rescudo*  
*7*



## ANEXO I DE LA RESCD-EXA: 122/2018 EXP-EXA: 8085/2018

### Tema 5: Calibración multivariada de segundo orden

Calibración multivariada de segundo orden: ventaja de segundo orden. Análisis paralelo de factores (PARAFAC). Resolución multivariada de curvas-cuadrados mínimos alternantes (MCR-ALS). Métodos basados en bilinealización de los residuos (RBL). Cifras de mérito. Uso de rutinas escritas en Matlab, toolbox para MCR-ALS y de la interfaz gráfica MVC2.

### Tema 6: Elementos de calibración multivariada de tercer orden

Calibración multivariada de tercer orden: ventajas de su implementación. Análisis paralelo de factores (PARAFAC). Resolución multivariada de curvas-cuadrados mínimos alternantes (MCR-ALS). Análisis paralelo de factores aumentado (APARAFAC). Métodos basados en trilinealización de los residuos (RTL). Cifras de mérito. Uso de rutinas escritas en Matlab y de la interfaz gráfica MVC3.C.2.

**Programa de Trabajos Prácticos:** Análisis de artículos científicos, resolución mediante interfaz gráfica escrita en Matlab y discusión de los resultados.

### Bibliografía:

- 1) H.C. Goicoechea & A.C. Olivieri, "La Calibración en Química Analítica", (2007). Ed. UNL, Santa Fe, Argentina.
- 2) A.C. Olivieri, G.M. Escandar, Practical three-way calibration, Elsevier, Waltham (MA), USA, 2014.
- 3) AC Olivieri, GM Escandar, HC Goicoechea, A Muñoz de la Peña (Editores), "Fundamentals and Analytical Applications of Multi-way Calibration" (2015). Ed. Elsevier.
- 4) A.C. Olivieri, F Iñon, H.C. Goicoechea, "MVC1: an integrated MatLab toolbox for first-order multivariate calibration" Chemom. Intell- Laborat. Syst. 73 (2004) 189–197
- 5) A.C. Olivieri, H-L. Wu, R-Q. Yu, "MVC2: A MATLAB graphical interface toolbox for second-order multivariate calibration". Chemom. Intell- Laborat. Syst. 96 (2009) 246–251.
- 6) A.C. Olivieri, H-L. Wu, R-Q. Yu, "MVC3: A MATLAB graphical interface toolbox for third-order multivariate calibration". Chemom. Intell- Laborat. Syst. 116 (2012) 9–16.
- 7) J. Jaumot, R. Gargallo, A. de Juan, R. Tauler, "A graphical user-friendly interface for MCR-ALS: a new tool for multivariate curve resolution in MATLAB". Chemom. Intell. Laborat. Syst. 76 (2005) 101–110.
- 8) A. Smilde, R. Bro, P. Geladi, "Multi-way Analysis with Applications in the Chemical Sciences". John Wiley & Sons Ltd, The Atrium, Southern Gate, Chichester, 2004.
- 9) C.A. Andersson, R. Bro, "The N-way Toolbox for MATLAB", Chemom. Intell. Laborat. Syst. 52 (2000) 1–4.
- 10) G.M. Escandar, H.C. Goicoechea, A. Muñoz de la Peña, A.C. Olivieri, Second- and higher-order data generation and calibration: A tutorial, Anal. Chim. Acta 806 (2014) 8–26.
- 11) MR. Alcaráz, R Brasca, MS. Cámara, MJ. Culzoni, AV. Schenone, CM. Teglia, L Vera-Candioti, HC. Goicoechea, Chapte 7 "Multiway Calibration Approaches to Handle Problems Linked to the Determination of Emergent Contaminants in Waters" in "Current Applications of Chemometrics" (2014), Editor MohammadrezaKhanmohammadi, Ed. Nova SciencePublishers, Inc.

*Handwritten signature*  
4



**ANEXO I DE LA RESCD-EXA: 122/2018 EXP-EXA: 8085/2018**

- 12) M. Alcaráz, G.G. Siano, M.J. Culzoni, A. Muñoz de la Peña, H.C. Goicoechea. "Modeling four and three-way fast high-performance liquid chromatography with fluorescence detection data for quantitation of fluoroquinolones in water samples". *Anal. Chim. Acta.* 809 (2014) 37–46.
- 13) H.C. Goicoechea, M.J. Culzoni, M.D. Gil García, M. Martínez Galera. "Chemometric strategies for enhancing the chromatographic methodologies with second-order data analysis of compounds when peaks are overlapped". *Talanta* 83 (2011) 1098–1107.
- 14) M.R. Alcaraz, L. Vera-Candioti, M.J. Culzoni, H.C. Goicoechea. "Ultrafast quantitation of six quinolones in water samples by second order capillary electrophoresis data modeling with multivariate curve resolution–alternating least squares". *Anal. Bioanal. Chem.* 406 (2014) 2571–2580.
- 15) C.J.G. Colares, T.C.M. Pastore, V.T.R. Coradin, L.F. Marques, A.C.O. Moreira, G.L. Alexandrino, R.J. Poppi, J.W.B. Braga. "Near infrared hyperspectral imaging and MCR-ALS applied for mapping chemical composition of the wood specie *Swietenia Macrophylla* King (Mahogany) at microscopic level". *Microchem. J.* 124 (2016) 356–363.

Dr. MARÍA BITA MARTEARENA  
SECRETARIA ACADÉMICA Y DE INVESTIGACIÓN  
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa

\*\*\*\*\*



Dr. JORGE FERNANDO YAZLLE  
DECANO  
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa