



Universidad Nacional del Nordeste  
 Facultad de Ciencias Exactas y  
 Naturales y Agrimensura

2018- AÑO DEL CENTENARIO DE LA  
 REFORMA UNIVERSITARIA



RESOLUCION N°: 0999 18

CORRIENTES, 29 NOV 2018

**VISTO** el Expediente N° 09-2018-06277 por el cual la Dra. Celina María Monzón eleva propuesta y solicita autorización para el dictado del Curso de Posgrado: "ANÁLISIS DE DATOS MULTIVARIADOS PARA LA CALIBRACIÓN EN QUÍMICA ANALÍTICA"; y

**CONSIDERANDO:**

**QUE** se detallan convenientemente la fundamentación, los objetivos, contenidos y modalidad del curso

**QUE** el curso está destinado a graduados de las carreras de Licenciatura en Química, Licenciatura en Física, Licenciatura en Biotecnología, Agronomía, Veterinaria, y otras carreras relacionadas.

**QUE** tendrá una carga horaria total de 45 horas teórico-prácticas.

**QUE** los Profesores Dictantes: Dr. Héctor C. Goicoechea (FBCB-UNL), Dra. Mirta Raquel Alcaraz (FBCB-UNL), Dra. Silvana Azcarate (UNLPam), Dr. Mario Raúl Delfino (h) (FaCENA-UNNE) cuentan con experiencia en el tema como se desprende de sus respectivos curriculum vitae.

**QUE** la coordinación del curso estará a cargo de la Dra. Celina María Monzón.

**QUE** se establece para su dictado un cupo mínimo de 20 (veinte) y un cupo máximo de 60 (sesenta) participantes.

**QUE** la fuente de financiamiento será mediante el cobro de un arancel de \$2500 (dos mil quinientos pesos) para graduados en general. Doctorandos UNNE que acrediten su condición de alumno regular: \$1500 (mil quinientos pesos).

**QUE** se dictará desde el 11 al 15 de marzo de 2019.

**QUE** cuenta con el aval de la Secretaría de Investigación y Posgrado;

**QUE** en la sesión del día 29/11/2018, este Cuerpo resolvió tratar el presente expediente, y hacer lugar a lo solicitado;


**POR ELLO:**

**EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES Y AGRIMENSURA**

**RESUELVE:**

**ARTÍCULO 1°) AUTORIZAR** el dictado del Curso de Posgrado "ANÁLISIS DE DATOS MULTIVARIADOS PARA LA CALIBRACIÓN EN QUÍMICA ANALÍTICA", de 45 horas, bajo la coordinación de la Dra. Celina María Monzón, y cuyo programa obra en ANEXO de la presente Resolución.

  
 Dr. RODOLFO HORACIO ROMERO  
 Secretario de Investigación y Posgrado  
 Fa.C.E.N.A.

  
 Mgter. MARÍA VIVIANA GUIOY GUGLIELMONE  
 DECANA  
 Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura  
 Universidad Nacional del Nordeste



Universidad Nacional del Nordeste  
Facultad de Ciencias Exactas y  
Naturales y Agrimensura

2018- AÑO DEL CENTENARIO DE LA  
REFORMA UNIVERSITARIA

RESOLUCION Nº: 0999 18  
CORRIENTES, 29 NOV 2018

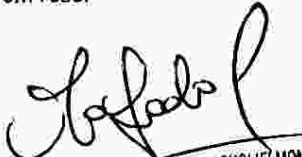
**ARTÍCULO 2º) AUTORIZAR** el monto del arancel establecido de \$2500 (dos mil quinientos pesos) para graduados en general. Doctorandos UNNE que acrediten su condición de alumno regular: \$1500 (mil quinientos pesos).

**ARTÍCULO 3º) EMITIR** los respectivos certificados a los asistentes que hayan cumplimentado con las diferentes actividades exigidas en el presente curso.

**ARTÍCULO 4º) REMITIR** las presentes actuaciones la Secretaría de Investigación y Posgrado

**ARTÍCULO 5º) REGÍSTRESE,** comuníquese y archívese.

  
Dr. RODOLFO HORACIO ROMERO  
Secretaría de Investigación y Posgrado  
F.C.E.N.A.

  
Mgter. MARÍA VIVIANA GODOY GUGLIELMO  
DECANA  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura  
Universidad Nacional del Nordeste

ES COPIA

Enviada de Jesús Navarro  
al Comandante en Despacho  
F.C.E.N.A.



Universidad Nacional del Nordeste  
Facultad de Ciencias Exactas y  
Naturales y Agrimensura

2018- AÑO DEL CENTENARIO DE LA  
REFORMA UNIVERSITARIA



RESOLUCION N°: 0999 18

CORRIENTES,

29 NOV 2018

## ANEXO I

### A.- DATOS GENERALES DEL CURSO:

#### 1. Denominación del Curso:

Consignar el nombre del Curso

Curso de Posgrado: Análisis de datos multivariados para la calibración en Química Analítica

#### 2. Unidad Académica Responsable:

Consignar la/s Facultades responsables del dictado del Curso

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura - UNNE

#### 3. Duración:

Consignar la duración en meses, semanas o días

5 días

#### 4. Carga horaria:

Consignar la carga horaria presencial discriminada por: horas teóricas, teórico-prácticas, prácticas.

*Se recuerda que la carga horaria mínima de estos cursos es de 30 horas presenciales y una máxima de 150 horas presenciales, con evaluación final.*

45 horas. Cinco clases teórico-prácticas de 9 horas diarias.

#### 5. Destinatarios del curso:

Consignar a quiénes está dirigido el Curso. Sólo podrán realizar Cursos de Postgrado quienes posean Título de Grado Universitario.

Graduados de las carreras de Bioquímica, Licenciatura en Química, Ingeniería Química, Licenciatura en Física, Licenciatura en Biotecnología, Ingeniería Agronómica, Veterinaria y otras carreras relacionadas.

#### 6. Cupo:

Se debe especificar cupo máximo y mínimo.

ES COPIA



Universidad Nacional del Nordeste  
Facultad de Ciencias Exactas y  
Naturales y Agrimensura

2018- AÑO DEL CENTENARIO DE LA  
REFORMA UNIVERSITARIA

RESOLUCION N°:

0999 18

CORRIENTES,

29 NOV 2018

Mínimo: 20

Máximo: 60

**7. Certificaciones a otorgar:**

Sólo se otorgará certificación de aprobación del Curso. Los certificados se expedirán conforme al formato vigente, según Anexo II.

Aprobación

**8. Docentes a cargo (adjuntar curriculum):**

Señalar Nombres y Apellidos de los docentes a cargo del Curso, y funciones que cumplirán dentro del equipo, por ejemplo: Director, Coordinador, Profesor Dictante, Tutor, etc.

Director del curso: Dr. Héctor C. Goicoechea (FBCB-UNL).

Coordinadora: Dra. Celina María Monzón (FaCENA-UNNE)

Docentes: Dra. Mirta Raquel Alcaraz (FBCB-UNL), Dra. Silvana Azcarate (UNLPam), Dr. Mario Raúl Delfino (h) (FaCENA-UNNE)

Auxiliar docente de las clases prácticas: Lic. Ramón Alberto Martínez (FaCENA-UNNE)

**9. Fuente/s de financiamiento:**

Consignar con qué recursos se financiará el Curso.

El curso será autofinanciable, con las inscripciones de los alumnos.

Inscripción: \$2500 (dos mil quinientos pesos) para graduados en general. Doctorandos UNNE que acrediten su condición de alumno regular: \$1500 (mil quinientos pesos).

**B.- PROGRAMACIÓN DIDÁCTICA DEL CURSO:**

**1. Fundamentación:**

Referirse brevemente a la necesidad que dio origen a la propuesta, qué demanda se estaría atendiendo con su dictado, a qué rama del saber se aporta, etc.

ES COPIA



Universidad Nacional del Nordeste  
Facultad de Ciencias Exactas y  
Naturales y Agrimensura

2018- AÑO DEL CENTENARIO DE LA  
REFORMA UNIVERSITARIA



RESOLUCION N°:

0999 18

CORRIENTES,

29 NOV 2018

El avance de la Química Analítica ha hecho que las mediciones sean multivariadas (múltiples datos instrumentales para una única muestra), con gran contenido de información, con lo cual los métodos tradicionales de análisis y procesamiento de datos se vuelven insuficientes (Olivieri, 2015). Uno de los campos de la Quimiometría es el desarrollo y aplicación de nuevos métodos de Calibración Multivariable, que permiten extraer la máxima información química del análisis de muestras (Goicoechea, 2007). Entre las ventajas del procesamiento de datos multivariados podemos citar: mayor sensibilidad, mayor selectividad, determinación de analitos en presencia de interferentes (Escandar, 2014).

Este curso está destinado al estudio de pre-procesamiento de datos, calibración de primer orden y órdenes superiores, enseñanza del manejo de los softwares especializados, y uso apropiado de algoritmos correspondientes.

## 2. Objetivos del Curso:

Señalar qué objetivos se persiguen con el dictado del Curso. En un punto aparte se puede hacer referencia a los **objetivos de aprendizaje** del Curso, es decir qué conocimientos lograrán los participantes del mismo.

Objetivo del curso: Presentar la calibración multivariada como una herramienta de la quimiometría que permite analizar datos complejos.

Objetivos de aprendizaje:

- Identificar los distintos tipos de calibración
- Seleccionar el método adecuado para procesar datos de un problema específico, y utilizar el software apropiado
- Interpretar casos reales de calibración multivariada
- Analizar imágenes hiperespectrales de IR

## 3. Contenidos:

Indicar los contenidos mínimos que se desarrollarán durante el curso, según el criterio de organización adoptado, ejemplo: unidades, módulos, etc.

Recordar:

- que la cantidad de contenido debe ser acorde a las horas de dictado,
- que estos cursos deben atender a contenidos relevantes para una formación de Postgrado,
- que este punto se refiere a los contenidos seleccionados y organizados curricularmente, no a un listado minucioso de temas.

ES COPIA



2018- AÑO DEL CENTENARIO DE LA  
REFORMA UNIVERSITARIA

*Universidad Nacional del Nordeste*  
*Facultad de Ciencias Exactas y*  
*Naturales y Agrimensura*

RESOLUCION N°:

0999 18

CORRIENTES,

29 NOV 2013

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. 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.

Tema 2. Pre-procesamiento de datos. Métodos de escalado multidimensional. Comparación de métodos de normalización. Uso de derivadas. Estrategias para manipular datos ruidosos: suavizado (Savitzky-Golay, moving window average) y filtros (Fourier, wavelet). Algoritmos para alinear señales que presentan corrimientos. Corrección de línea de base.

Tema 3. 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.

Tema 4: 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 5: 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.

Tema 6: Análisis de imágenes hiperespectrales obtenidas con microscopía IR. Metodología de obtención y usos. Preprocesamiento de las señales para eliminar "bad pixels". Utilización de MCR-ALS para la determinación de las proporciones de los componentes de interés. Uso de rutinas escritas en Matlab y del toolbox para MCR-ALS.

Cronograma estipulado

Lunes	Martes	Miércoles	Jueves	Viernes
Temas 1 y 2	Tema 3	Tema 4	Tema 5	Tema 6 y Evaluación

ES COPIA



Universidad Nacional del Nordeste  
Facultad de Ciencias Exactas y  
Naturales y Agrimensura

2018- AÑO DEL CENTENARIO DE LA  
REFORMA UNIVERSITARIA



RESOLUCION N°:

0999 18

CORRIENTES,

29 NOV 2018

#### 4. Metodología de enseñanza:

Consignar las estrategias de enseñanza que se priorizarán en el dictado del curso, por ejemplo: taller, clases teóricas, trabajos prácticos de laboratorio, tutorías, trabajos de campo, elaboración de informes y monografías, trabajos grupales, etc.

Las clases se desarrollarán con modalidad teórico-práctica, resolución de problemas y manejo de software.

Se utilizarán dos tipos de programas, todos elaborados en Matlab. Para calibración univariada y multivariada se usarán las interfaces gráficas MVC1, MVC2 y UNIVAR que se encuentran compiladas y accesibles de manera gratuita. Para la aplicación de MCR-ALS y pre-procesamiento de datos se utilizarán rutinas gratuitas pero que requieren tener instalado el programa Matlab en las computadoras. Se solicitará a los alumnos que asistan que lleven sus computadoras portátiles.

El curso tiene muchas horas de trabajo práctico utilizando los programas, con la asistencia personalizada del cuerpo docente. Cada día estará organizado comenzando con una clase teórica abarcando cada tema propuesto, y luego trabajo con datos que serán proporcionados a los alumnos. Este trabajo computacional llevará mucho tiempo ya que habrá que enseñar el manejo de los datos (obtención, conversión a los formatos que requieren los programas y aplicación de los distintos algoritmos utilizados en las diferentes etapas). Al finalizar el día, se realizará un resumen de lo trabajado para que los alumnos fijen los conocimientos.

Se prevén intervalos de 1,30 horas de clase con descansos de 15 minutos.

#### 5. Instancias de evaluación durante el curso:

Detallar en qué consistirá la evaluación de los aprendizajes del alumno, por ejemplo, evaluación de trabajos prácticos individuales o grupales, exámenes escritos, evaluaciones orales, monografías. Consignar la cantidad y frecuencia de las evaluaciones y si se prevén instancias de recuperación.

Las últimas 4 horas del curso serán destinadas a la evaluación.

En dicha evaluación se les proporcionará un cuestionario (Bibliografía: AC Olivieri, GM Escandar, HC Goicoechea, A Muñoz de la Peña (Editores), "Fundamentals and Analytical Applications of Multi-way Calibration" (2015). Ed. Elsevier.). Por otra parte, se suministrarán datos para que los alumnos procesen y preparen un informe. En el mismo responderán sobre aspectos básicos desarrollados en el curso y deberán demostrar haber adquirido aptitudes para aplicar los algoritmos indicados en cada caso. Este informe se entregará en formato electrónico al finalizar el examen. El cuestionario deberá ser respondido correctamente en un 60%, el informe deberá dar evidencia del adecuado manejo de los algoritmos. Se asignará calificación (promediando ambas instancias) en la escala del 1 al 10.

ES COPIA



Universidad Nacional del Nordeste  
Facultad de Ciencias Exactas y  
Naturales y Agrimensura

2018- AÑO DEL CENTENARIO DE LA  
REFORMA UNIVERSITARIA

RESOLUCION N°:

0999 18

CORRIENTES,

29 NOV 2018

**6. Requisitos de aprobación del curso:**

Enumerar cuáles serán las exigencias para otorgar la aprobación del Curso, además de cumplir con las evaluaciones anteriormente mencionadas, por ejemplo, asistencia, pago de arancel, etc.

Pago de arancel  
Asistencia al 80% de las clases  
Aprobación del examen escrito

**7. Cronograma estimativo:**

En este punto consignar cómo se distribuirán las horas de dictado del curso, en el tiempo de duración establecido. Se puede completar el siguiente cuadro consignando la fecha de los días de semana en que se dictará el curso y la cantidad de horas por día, según los meses de duración.

Meses	Lunes	Martes	Miércoles	Jueves	Viernes	Sábados
Marzo	11/03 9-18	12/03 9-18	13/03 9-18	14/03 9-18	15/03 9-18	

**8. Infraestructura y equipamiento necesarios:**

Consignar las instalaciones y recursos materiales necesarios para el dictado del Curso.

Salón de posgrado (pizarra, proyector y computadora)  
Se solicitará a los estudiantes que concurren con sus computadoras portátiles.  
SOFTWARE a emplear: MATLAB y MVC

**Requerimientos operacionales:**

Sistema operativo

Windows: Windows 7 SP1 en adelante, Windows Server 2008 SP2 en adelante.

Mac: macOS 10.10 - 10.11

Linux: Kernel 2.6 o superior, glibc 2.11 o superior.

Procesador: Intel o AMD x86-64 con soporte de instrucciones AVX2.

Disco: 2 GB solo para MATLAB, 4-6 GB para una instalación típica.

RAM: 1GB mínimo, 4 GB recomendado.

Tarjeta gráfica: Soporte para OpenGL 3.3 recomendado con 1 GB en GPU

ES COPIA





Universidad Nacional del Nordeste  
Facultad de Ciencias Exactas y  
Naturales y Agrimensura

2018- AÑO DEL CENTENARIO DE LA  
REFORMA UNIVERSITARIA



RESOLUCION Nº:

0999 18

CORRIENTES,

29 NOV 2018

### 9. Bibliografía básica:

Enumerar los textos básicos que serán manejados total o parcialmente durante el curso, que den cuenta del enfoque adoptado y su actualización.

- 1) A.C. Olivieri, G.M. Escandar, Practical three-way calibration, Elsevier, Waltham (MA), USA, 2014.
- 2) AC Olivieri, GM Escandar, HC Goicoechea, A Muñoz de la Peña (Editores), "Fundamentals and Analytical Applications of Multi-way Calibration" (2015). Ed. Elsevier.
- 3) 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
- 4) 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.
- 5) 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.
- 6) 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.
- 7) 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.
- 8) C.A. Andersson, R. Bro, "The N-way Toolbox for MATLAB", Chemom. Intell. Laborat. Syst. 52 (2000) 1–4.
- 9) 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.
- 10) H.C. Goicoechea & A.C. Olivieri, "La Calibración en Química Analítica", (2007). Ed. UNL, Santa Fe, Argentina.
- 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 Mohammadreza Khanmohammadi, Ed. Nova Science Publishers, Inc.
- 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 fuorescence 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.

ES COPIA