

PROGRAMA ANALITICO:

UNIDAD 1: NOCIONES DE PROGRAMACIÓN

Introducción a la programación. Descripción del entorno de trabajo. Variables y funciones básicas. Tipos de datos. Operaciones básicas con escalares, vectores, matrices y arreglos n-dimensionales. Operadores y estructuras de control. Herramientas gráficas. Programación de funciones y scripts sencillos. Toolbox y Demos.

UNIDAD 2: HERRAMIENTAS MATEMÁTICAS PARA ANÁLISIS MULTIVARIADO

Algebra matricial. Conceptos básicos. Dependencia lineal. Resolución de sistemas de ecuaciones. Determinantes. Inversión de matrices. Herramientas empleadas en el análisis multivariado. Autovalores y autovectores. Diagonalización de matrices. Descomposición en valores singulares

UNIDAD 3: ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES

Conceptos básicos de estadística. Varianza, covarianza y correlación. Matrices covarianza y correlación para datos multivariados. Autovalores y autovectores de la matriz de covarianzas. Análisis de componentes principales, proyecciones ortogonales y reducción de la dimensionalidad. Estimación del número de componentes principales. Interpretación física de “scores” y “loadings”. Representaciones gráficas. Validación de modelos. Ejemplos de aplicación.

UNIDAD 4: RESOLUCIÓN DE CURVAS POR CUADRADOS MÍNIMOS ALTERNANTES

Matrices de datos bilineales. Modelado de datos de espectroscopia de absorción. Modelos “blandos” vs. modelos “duros”. Análisis de factores. Ambigüedades rotacionales y de escala. Pseudo-rango, rango local y deficiencia de rango. Estimación del número de contribuciones. Descomposición en valores singulares (SVD). Estimación de perfiles iniciales mediante los algoritmos análisis de factores evolutivo (EFA) y automodelado interactivo de fácil uso (SIMPLISMA). Resolución de curvas por cuadrados mínimos alternantes (ALS). Significado físico y empleo de restricciones. Utilización de matrices expandidas. Interfaz gráfica para la aplicación de la metodología MCR-ALS.

UNIDAD 5: DATOS TRILINEALES. ANÁLISIS PARALELO DE FACTORES

Estructuras de datos de tres vías. Producto externo entre vectores. Tensores. Descomposición canónica y análisis paralelo de factores (PARAFAC). Fluorescencia y matrices de excitación emisión (EEM). Datos reales y limitaciones del modelo PARAFAC. Etapas de pre-procesamiento: emisión del blanco, corrección de los efectos de filtro interno y eliminación de las señales asociadas a los fenómenos de dispersión. Fase exploratoria y fase de análisis. Aplicación de restricciones. Velocidad de convergencia. Validación del modelo: matrices de residuos, test de consistencia del núcleo, significado físico de los factores y validación cruzada.

UNIDAD 6: SIMULACION, AJUSTE DE PARÁMETROS Y ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD

Introducción a la simulación numérica. Sistemas de ecuaciones diferenciales. Integración monopaso. Métodos Runge-Kutta. Paso variable. Integración multipaso. Métodos predictor-corrector. Optimización sin restricciones. Métodos Simplex y del Máximo Descenso. Algoritmo de Levenberg-Marquardt y parámetro de amortiguamiento. Optimización con restricciones. Nociones sobre análisis de sensibilidad y reducción de dimensiones. Sensibilidad local y sensibilidad global.

METODOLOGÍA DE EVALUACIÓN

Para la aprobación del curso se requerirá una asistencia mínima del 75% a las clases (tanto presenciales como virtuales) y la presentación de una monografía de investigación sobre problemas específicos definidos por el equipo docente para cada alumno.

BIBLIOGRAFIA SUGERIDA

* Practical Guide to Chemometrics. Ed. P. Gemperline. 2006, CRC Press, ISBN 1-57444-783-1, USA *

Principal component analysis. R. Bro and A. K. Smilde. *Anal. Methods* 6 (2014) 2812

* Using principal component analysis to detect outliers in ambient air monitoring studies. R. Brown, S. Goddard & A. Brown. *Intern. J. Environ. Anal. Chem.* 90 (2010) 761

* Multivariate Curve Resolution (MCR). Solving the mixture analysis problem. Anna de Juan, Joaquim Jaumot and Romà Tauler. *Anal. Methods*, 2014,6, 4964-4976

* Parallel Factor Analysis of Excitation–Emission Matrix Fluorescence Spectra of Water Soluble Soil Organic Matter as Basis for the Determination of Conditional Metal Binding Parameters. Tsutomu Ohno, A. Amirbahman, R. Bro. *Environ. Sci. Technol.* 42 (2008) 186

* Characterizing dissolved organic matter fluorescence with parallel factor analysis: a tutorial. C. A. Stedmon and R. Bro. *Limnol. Oceanogr.: Methods* 6 (2008) 572

* S. D. Brown, R. Tauler, B. Walczak-Comprehensive Chemometrics Vol 1, Chemical and Biochemical Data Analysis -Elsevier Science (2009), ISBN: 978-0-444-52702-8, Slovenia

* Experimental and numerical study of the thermal destruction of hexachlorobenzene. N. El Mejdoub, A. Souizi, L. Delfosse. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis* 47 (1998) 77

* Visualization methods in analysis of detailed chemical kinetics modelling. A. Broe Bendtsen, P. Glarborg, K. Dam-Johansen. *Computers and Chemistry* 25 (2001) 161

* Reduced Mechanisms for Propane Pyrolysis. A. Tomlin, M. Pilling, J. Merkin, J. Brindley, N. Burgess, A. Gough. *Ind. Eng. Chem. Res.* 34 (1995) 3749