

Curso de Postgrado Procesamiento de Señales Analíticas

Programa

I. Química Analítica Moderna

Desarrollos en Química Analítica Moderna. ¿Qué es Quimiometría?. Una revisión de conceptos de estadística básica. Teoría del muestreo (ToS). Definiciones. Teoría del muestreo de Pierre Gy. Error analítico.

II. Automatización en Química Analítica

Introducción a la automatización en Química Analítica. Aspectos tecnológicos, económicos, organizativos y sociales de la automatización. Perspectiva histórica. Operaciones unitarias de los procesos químico-analíticos. Técnicas continuas y discontinuas. Análisis en Flujo. Principales componentes de los sistemas automatizados. Sistemas de introducción y tratamiento de muestra.

III. Componentes y circuitos eléctricos

Leyes de la electricidad. Circuitos de corriente alterna. Filtros basados en circuitos RC. Semiconductores y dispositivos con semiconductores. Suministros de potencia y reguladores. Dispositivos de lectura.

IV. Amplificadores operacionales en los instrumentos químicos

Propiedades de los amplificadores operacionales. Circuitos para los amplificadores operacionales. Amplificadores y medición de las señales de los transductores. Aplicación de amplificadores operacionales a operaciones matemáticas. Amplificadores operacionales como comparadores.

V. Señales Químicas

Señales y tratamiento de señales. Clasificación de las señales. Señales analógicas y digitales. Naturaleza de señales en química analítica. Concepto de frecuencia en señales continuas y discretas en el tiempo. Señales sinusoidales continuas en el tiempo. Señales sinusoidales discretas en el tiempo. Exponenciales complejas armónicamente relacionadas. Conversiones analógica-digital y digital-analógica. Muestreo de señales analógicas. Teorema de muestreo. Cuantificación de señales continuas en amplitud. Cuantificación de señales sinusoidales

VI. Pre-procesamiento de señales analíticas

Artefactos de datos y preprocesamiento. Ruido. Tipo y fuentes de ruido. Desplazamiento y deriva en la línea base. Dispersión de luz. Desalineación temporal y espectral. Normalización, escalado y transformaciones por elementos. Artefactos en técnicas acopladas. Enfoques para seleccionar una estrategia de preprocesamiento. Enfoques de prueba y error. Inspección visual. Parámetros de calidad

VII. Procesamiento de señales en química analítica

Procesamiento de Señales. Suavizado y filtrado digital. Filtro móvil medio. Suavizado polinómico: Filtro Savitzky-Golay. Filtro recursivo: Filtro Kalman. Derivadas de señal. Integración para determinación de área. Transformadas: Fourier y Hadamard. Filtrado de señales. Convolución y deconvolución. Funciones "Spline". Análisis Wavelet.

Análisis de series de tiempo. Autocorrelación y autovarianza. Procesos aleatorios con deriva y periodicidades. Autoregresión

VIII. Diseño de experimentos (DoE)

Diseños Factoriales completo y fraccionado. Diseño de Plackett-Burman. Diseño Central Compuesto (CCD). Modelos de Optimización. Método de Superficie de Respuesta.

IX. Álgebra Lineal

Operaciones con vectores y matrices. Propiedades del álgebra de matrices. Matrices inversibles. Cálculo de la inversa. Determinantes. Sistemas de ecuaciones.

X. Modelos de Regresión Multivariados

Regresión lineal: calibración univariada, exactitud y comparación de métodos analíticos. Regresión lineal múltiple. Calibración Directa: Cuadrados mínimos clásicos (CLS). Calibración Inversa: Cuadrados mínimos inversos (ILS) y Regresión por componentes principales (PCR). Regresión en cuadrados mínimos parciales (PLS). Regresión en cuadrados mínimos no-lineales. Cifras de mérito en regresión multivariada

XI. Reconocimiento de patrones

Pre-procesamiento de datos. Normalización a longitud 1. Matriz de varianza-covarianza y matriz de correlación. Métodos no supervisados. Análisis factorial. Análisis de componentes principales (PCA). Estimación de componentes principales. Interpretación gráfica de componentes principales. Descomposición de valores singulares. Métodos supervisados. Método de vecinos cercanos. Modelado blando independiente de analogías de clases

Trabajos Experimentales

TP1: Uso de muestras de dulces para aprender sobre técnicas de muestreo, segregación y evaluación de datos estadísticos.

TP2: Espectrofotometría de absorción: determinación de múltiples componentes utilizando datos de absorbancia y primera derivada.

TP3: Determinación simultánea de cobalto, cobre y níquel por regresión lineal múltiple.

Bibliografía

No existen libros de texto básicos que puedan abarcar la totalidad de los temas de esta asignatura. Se propone la siguiente lista de textos sobre los diversos tópicos. Antes de cada unidad temática se brindará a los alumnos los capítulos de los textos o los trabajos publicados consultados específicamente para el tema en discusión. La siguiente es una lista de textos de consulta.

a. *Textos específicos sobre automatización y miniaturización:*

- "Automatización y miniaturización en Química Analítica", M. Valcárcel, M. S. Cardenas, (Springer-Verlag Ibérica, S. A., Barcelona, 2000).

- "Automatic Methods Analysis", M. Valcárcel, M. D. Luque de Castro (Elsevier, Amsterdam, 1988).

b. Textos generales sobre electrónica:

- "Principios de Análisis Instrumental", D. A. Skoog, F. J. Holler, S. R. Crouch (Cengage Learning, 6th. Ed. 2008)
- "Introductory Electronics for Scientists and Engineers", R. E. Simpson, Prentice Hall (Englewood Cliffs, 1987).
- "The Art of Electronics", P. Horowitz y W. Hill, (Cambridge University Press, 1989).
- "Electric Circuits", J. W. Nilsson y S. A. Riedel, (Prentice Hall, 9th. Ed., 2010).

c. Textos específicos sobre procesamiento de señales:

- "Data analysis and Signal Processing in Chromatography", A. Felinger, (Elsevier Science, Amsterdam, 1998).
- "Chemometrics: Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry", M. Otto, (Wiley-VCH, 3rd Ed., New York, 1999).
- "Chemometrics: data driven extraction for science", R. G. Brereton (John Wiley & Sons, 2nd Ed, 2018)
- "Chemometrics: A Practical Guide", K. R. Beebe, R. J. Pell, M. B. Seasholtz, (Wiley, 1998).
- "Señales y Sistemas", A.V. Oppenheim, A. S. Willsky, S.H. Nawab, (2da. edición, Pearson Educación, 1998).

d. Textos generales de quimiometría:

- "Chemometrics: Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry", M. Otto, (Wiley-VCH, 3rd Ed., New York, 1999).
- "Chemometrics: data driven extraction for science", R. G. Brereton (John Wiley & Sons, 2nd Ed, 2018)
- "Quimiometría", G. Ramis Ramos y M. C. García Álvarez-Coque, (Ed. Síntesis, 2001).
- "La calibración en Química Analítica", A. C. Olivieri, H. Goicoechea, 2008.
- "Quimiometría: una aproximación práctica", A. C. Olivieri (Ediciones Científicas Argentinas, 2017).
- "Multivariate Data Analysis", K. Esbensen, B. Swarbrick (CAMO, 6th Ed., 2018)
- "Chemometrics: A Practical Guide", K. R. Beebe, R. J. Pell, M. B. Seasholtz, (Wiley, 1998).