

**Aplicación de métodos quimiométricos y herramientas numéricas al estudio de diferentes sistemas de interés fisicoquímico, ambiental o biológico**

Dr. Sebastián García Einschlag

*Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA, UNLP, CCT La Plata-CONICET)*

- **Lunes 22 de septiembre a las 13 hs.**
- **Aula: RFP 3er piso DQIAQF/INQUIMAE**

### Resumen

La descripción de sistemas complejos puede abordarse mediante dos enfoques matemáticos. Los modelos “rígidos” se basan en ecuaciones que representan leyes fisicoquímicas, lo que resulta apropiado para describir reacciones simples o procesos en equilibrio, aunque su aplicación suele resultar muy difícil cuando intervienen múltiples variables y fenómenos. En contraste, los modelos “blandos” o empíricos se basan en correlaciones u otras relaciones estadísticamente significativas lo que permite identificar patrones y obtener representaciones predictivas de los datos sin necesidad de postular un modelo a priori, aunque su validez se restringe al dominio experimental considerado. En este seminario se presentarán ejemplos del uso combinado de ambos enfoques en el análisis de procesos fisicoquímicos, ambientales y biológicos. La exposición se organizará en tres partes: i) una introducción a diferentes métodos quimiométricos —incluyendo superficies de respuesta (SRM), análisis de componentes principales (PCA), resolución multivariada de curvas (MCR-ALS), análisis de factores paralelos (PARAFAC) y análisis discriminante lineal (LDA); ii) la descripción de tres investigaciones recientes en las que la integración de modelos blandos y rígidos permitió interpretar resultados experimentales complejos; y iii) una síntesis de las ventajas que ofrece la integración de técnicas quimiométricas para mejorar la capacidad predictiva en el estudio de sistemas multivariados.