

Plan de Gestión de Datos

INFORMACION SOBRE EL PROYECTO
1. – Título del Proyecto
- Título del Proyecto (en castellano)
Redes neuronales artificiales en calibración multivariada: desarrollo de cifras analíticas de mérito para validación
- Título del Proyecto (en inglés)
Artificial neural networks in multivariate calibration: development of analytical figures of merit for validation
-Descripción del Proyecto (en castellano) Resumen
Las redes neuronales artificiales (ANNs) son de uso cada vez más frecuente en química analítica. En particular, una de sus grandes aplicaciones consiste en el desarrollo de métodos de calibración multivariada. Debido a su flexibilidad y versatilidad, estos algoritmos no paramétricos presentan una gran capacidad predictiva en contextos de no linealidad. Sin embargo, a diferencia de los métodos paramétricos, todavía revisten de cierta naturaleza de caja negra y su caracterización estadística aún no ha sido realizada completamente. En este trabajo se propone abordar el estudio de un modelo perceptrón multicapa (MLP), que presenta una formulación simple, pero que es ampliamente utilizado en aplicaciones dentro de la disciplina. En particular, se propone el desarrollo de herramientas teórico-computacionales para el procesamiento de datos en el contexto del desarrollo y validación de métodos de calibración, abordando como eje central, el estudio de las cifras analíticas de mérito (AFOMs). Las AFOMs son parámetros estadísticos que permiten la caracterización objetiva y rigurosa de un método analítico y, en el caso del MLP, las ecuaciones teóricas para la estimación de las mismas aún no ha sido descripta en su totalidad. Para ello se utilizarán antecedentes importantes dentro del área que incluyen la teoría de propagación de errores y las contribuciones realizadas para otros modelos de calibración lineales y no lineales. Asimismo, se hará uso del método de remuestreo conocido como bootstrap, como alternativa para resolver problemas de estimación en forma numérica.
-Descripción del Proyecto (en inglés) Resumen
Artificial neural networks (ANNs) are increasingly used in analytical chemistry. In particular, they are frequently used for the development of multivariate calibration methods. Due to their flexibility and versatility, these non-parametric strategies have great predictive capacity in non-linear contexts. However, in contrast to linear methods, they still have a certain “black box” nature and they have not yet been fully characterized from the statistical point of view. This work proposes to address the study of the so-called multilayer perceptron (MLP), which has a simple model formulation, but is widely used within the discipline. In particular, the development of theoretical-computational tools for data processing is proposed in the context of the development and validation of calibration methods, where the study of analytical figures of merit (AFOMs) is the central topic. AFOMs are statistical parameters that allow the objective and rigorous characterization of an analytical method and, in the case of MLP, the theoretical equations for their estimation have not yet been fully described. To do this, important background information within the area will be used, including error propagation theory and contributions made to other linear and non-linear calibration models. Besides, the resampling method known as bootstrap will be used as an alternative to solve estimation problems numerically.
-Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en castellano)

Calibración multivariada; Redes neuronales artificiales; Cifras de mérito

- Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en ingles)

Multivariate calibration; Neural networks; Figures of merit

2 – Datos del Director/ar del Proyecto

- Nombre y Apellido

FABRICIO ALEJANDRO CHIAPPINI

- Unidad Académica

FBCB

- Teléfono oficial de contacto

4575210

-Teléfono móvil de contacto

3426120771

-E-mail del Director/a del Proyecto

fabriciochiappini@gmail.com

DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO

-Describa la toma de muestras / datos a realizar

N/A

– Datos: ¿Existe alguna razón por la cual los datos declarados no deban ser puestos a disposición de la comunidad / ser de acceso público? (marque X)

X	NO
----------	-----------

SI. Elija una de las opciones:

- se encuentra en evaluación de protección por medio de patentes
- no se inició el proceso de evaluación de patentabilidad, pero podría ser protegible
- existe un contrato con un tercero que impide la divulgación
- Otro. Justifique.

– Período de Confidencialidad: Es el periodo durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El periodo máximo para la no publicación es de 5 (CINCO) años posteriores a su obtención. Luego de este periodo, los datos estarán disponibles para la comunidad / serán de acceso público.

Si Ud. considera que este tiempo es insuficiente, y necesita prorrogar el período de confidencialidad, indique sus motivos y la cantidad de años adicionales que considera necesarios. Marque su opción con “X”.



	1 (UN) año
	2 (DOS) años
	3 (TRES) años
	4 (CUATRO) año
	5 (CINCO) años
	Otro.
	Motivos:

INSTRUCTIVO PARA LLENADO DEL PLAN DE GESTIÓN DE DATOS

El PGD no es un documento definitivo, sino que se desarrollará a lo largo del ciclo de vida del proyecto.

INFORMACIÓN SOBRE EL PROYECTO

1- Título del Proyecto (en castellano): Deberá ingresar el título completo del proyecto (en castellano), indicando además el código asignado por la SCAyT.

- Título del Proyecto (en inglés): Deberá ingresar el título completo del proyecto en inglés.
- Descripción del Proyecto (en castellano): Deberá ingresar la descripción del Proyecto en castellano.
- Descripción del Proyecto (en inglés): Deberá ingresar la descripción del Proyecto en inglés.
- Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en castellano): Deberá ingresar tres palabras clave descriptivas del Proyecto, en castellano.
- Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en inglés): Deberá ingresar tres palabras clave descriptivas del Proyecto, en inglés.

2- Datos del Director/a del Proyecto

- Nombre y Apellido del Titular del Proyecto: Nombre completo y apellido del Titular del Proyecto.
- Unidad Académica: Nombre de la UA a la que pertenece el /la directora/a del Proyecto.
- Teléfono oficial de contacto: Número de teléfono de la oficina / laboratorio / Institución del Director/a del Proyecto, donde pueda ser contactado, incluyendo número de área / país (ej: Para la Santa Fe: + 54 9 342 4999-9999).
- Teléfono móvil de contacto: Número de t
- E-mail del Director/a del Proyecto: Correo electrónico de contacto del Director/a del Proyecto.

DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO

- Describa la toma de muestras / datos a realizar: Información descriptiva sobre la toma de muestras que resultaran en datos / conjuntos de datos. La descripción deberá incluir información de contexto (lugar de toman los datos; instrumentos etc).

Datos: ¿Existe alguna razón por la cual los datos declarados no deban ser puestos a disposición de la comunidad / ser de acceso público? Deberá marcar con una “X” la opción correcta. En caso de responder afirmativamente, deberá justificar debidamente, comprendiendo que solo en casos de extrema excepcionalidad esta restricción de acceso a los datos resulta practicable / aceptable.

-Período de Confidencialidad: Es el periodo durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El periodo máximo para la no publicación es de 5 (CINCO) años posteriores a su obtención. Luego de este periodo, los datos estarán disponibles para la comunidad / serán de acceso público. Si Ud. considera que este tiempo es insuficiente, y necesita prorrogar el período de confidencialidad, indique sus motivos y la cantidad de años adicionales que considera necesarios.