
Formulario de aprobación de curso de posgrado/educación permanente

Asignatura: Diseño Óptimo de Experimentos y Estimación de Parámetros

Modalidad:

Posgrado

☒

Educación permanente

☒

Profesores de la asignatura ¹:

Dra. Ing. Quím. Claudia Santiviago, Profesor Adjunto Grado 3, IIQ.

Dra. Ing. Quím. Jimena Ferreira, Profesor Adjunto Grado 3, IIQ, Asistente Grado 2, INCO.

Dr. Ing. Quím. Nicolás Goycochea, Profesor Adjunto Grado 3, IIQ.

Profesor Responsable Local ¹:

Dra. Ing. Quím. Claudia Santiviago, Profesor Adjunto Grado 3, IIQ.

Otros docentes de la Facultad: -----

Docentes fuera de Facultad:

¹ Se agrega CV porque el curso se dicta por primera vez.

Programa(s) de posgrado:

Maestría en Ingeniería Química, Doctorado en Ingeniería Química.

Instituto o unidad:

Instituto de Ingeniería Química.

Departamento o área

Departamento de Reactores – Grupo Biotecnología de Procesos para el Ambiente (BioProA, IIQ).

Grupo Ingeniería de Sistemas Químicos y de Procesos (glSQP, IIQ).

Laboratorio de Computación Heterogénea, (HCL, INCO).

Horas Presenciales: 40

(las horas están discriminadas en el ítem Metodología de enseñanza)

Nº de Créditos: 6

[Exclusivamente para curso de posgrado]

(de acuerdo a la definición de la UdelaR, un crédito equivale a 15 horas de dedicación del estudiante según se detalla en el ítem Metodología de enseñanza)

Público objetivo

Estudiantes de los programas de posgrado en Ingeniería de procesos y afines. Docentes que deseen actualizarse en la temática.

Cupos

Mínimo de 5 – Máximo de 20.

Objetivos

El objetivo de este curso es desarrollar la teoría del Diseño Óptimo de Experimentos, para formular planes experimentales para un modelo determinado como un problema de optimización combinatoria. A su vez, se incluye una introducción a las técnicas y fundamentos de estimación de parámetros.

Al finalizar el curso, los estudiantes deberán ser capaces de planificar experimentos con la menor cantidad posible de experimentación y una alta eficiencia. Podrán aplicar técnicas de diseño experimental, análisis de resultados y ajuste de funciones para obtener modelos que expliquen la influencia de las variables experimentales sobre una o varias variables de respuesta, así como optimizar estas variables.

Conocimientos previos exigidos

Fundamentos de Probabilidad y Estadística. Álgebra matricial.

Conocimientos previos recomendados

Programación básica.

Metodología de enseñanza

Descripción de la metodología: 16 clases de 2.5 h de duración, con exposición de conceptos, resolución de ejercicios de aplicación y estudio de casos integradores.

Las clases serán de carácter eminentemente práctico incluyendo la utilización de softwares para ilustrar los conceptos desarrollados. Alguno de estos softwares se utilizará por los estudiantes para la preparación del trabajo final.

Detalle de horas:

- Horas de clase (teórico-práctico): 35
- Horas de clase (práctico):
- Horas de clase (laboratorio):
- Horas de consulta: 2.5
- Horas de presentación del trabajo final: 2.5
 - Subtotal de horas presenciales: 40
- Horas de estudio: 30
- Horas de resolución de ejercicios/prácticos:
- Horas trabajo final: 20
 - Total de horas de dedicación del estudiante: 90

Forma de evaluación

Una vez finalizadas las clases, los estudiantes deberán planificar un diseño experimental, analizar resultados y ajustar modelos a partir de trabajos seleccionados por el equipo docente. Entregarán un informe escrito y realizarán una defensa oral del trabajo.

Temario

Unidad 01 – Fundamentos. Datos Experimentales

Determinismo y estocasticidad.

Conceptos clásicos de estadística: probabilidades, distribuciones de probabilidad, medias, varianzas, co-varianzas y correlaciones. Modelos estadísticos de probabilidades uni y multivariantes.

Caracterización de datos experimentales: medias muestrales, varianzas y covarianzas.

Pruebas de hipótesis: t-test, F-test y χ^2 test.

Evaluación experimental de distribuciones de probabilidad y de pruebas estadísticas.

Unidad 02 - Fundamentos de la Estimación de Parámetros

Discusión sobre modelado y modelos de procesos (empíricos y fenomenológicos).

Fundamentos de la estimación de parámetros y noción de distancia (Función Objetivo).

La formulación del problema de máxima verosimilitud (MV) y su aplicación en problemas ilustrativos.

Derivación de funciones objetivo (Mínimos Cuadrados Ponderados y Ordinarios) a partir de la MV bajo diferentes hipótesis.

Aplicación ilustrativa: Reconciliación de datos.

Errores paramétricos y de predicción.

Regiones de confianza paramétrica (elipses, autovalores y autovectores de la matriz de covarianza).

Soluciones analíticas para modelos lineales en parámetros.

Unidad 03 - Métodos Numéricos para la Estimación de Parámetros

Métodos numéricos para resolver el problema de estimación de parámetros. Presentación de técnicas determinísticas basadas en derivadas y basadas en procedimientos heurísticos. El cálculo determinista de las regiones de confianza de los parámetros. Presentación de técnicas estocásticas para la estimación de parámetros. La técnica de Montecarlo. La técnica del enjambre de partículas. El cálculo estocástico de las regiones de confianza de los parámetros. El problema de la reparametrización. Técnicas de Reparametrización para reducir la correlación (ej. Langmuir, Arrhenius).

Unidad 04 - Fundamentos de la Planificación Experimental

Planificación ideal y problemas reales de formulación. Objetivos de la planificación: estimación de parámetros, discriminación de modelos, optimización.

Discusión sobre el vínculo entre las rutinas de diseño experimental, las características estadísticas intrínsecas del problema experimental y las rutinas de estimación de parámetros.

Planificación ideal (aleatorización) y problemas reales (suposición de función suave).

Vínculo entre el diseño experimental, el modelo, la función objetivo y la precisión de los parámetros.

Principios de ortogonalidad (matriz diagonal) mediante reparametrización (variables normalizadas).

Unidad 05 - Planificación Secuencial de Experimentos

Diseño experimental óptimo. Criterios de optimalidad: A-óptimo, D-óptimo, E-óptimo.

Procedimientos para la optimización de planes experimentales.

Formulación de planes secuenciales para discriminación de modelos y estimación de parámetros.

Uso de elementos de la teoría de la información para el diseño experimental secuencial.

Unidad 06 – Diseños experimentales

Diseños Factoriales: factoriales con 2 factores a dos niveles, factoriales con 3 factores a dos niveles.

Diseños compuestos centrales: diseños factoriales + estrella axial. Factoriales con k factores a dos niveles.

Optimización de varias variables de respuesta: función de deseabilidad.

Diseños factoriales fraccionales: Confusión, ecuación generatriz de la fracción, resolución del diseño, diseños $2k-1$.

Diseños factoriales a 3 niveles (3k).

Diseños Factoriales fraccionales a 3 niveles: Box-Benhken.

Diseños factoriales con mezcla de factores a distintos niveles.

Diseños centrales rotatorios con varias variables de respuesta a optimizar. Procedimientos de análisis de superficies de respuesta.

Bibliografía

1. Análise de Dados Experimentais I. Fundamentos de Estatística e Estimção de Parâmetros, M. Schwaab e J.C. Pinto, *E-Papers*, Rio de Janeiro – RJ, 2007. (ISBN 979-85-7650-136-7)
2. Análise de Dados Experimentais II. Planejamento de Experimentos, M. Schwaab e J.C. Pinto, *E-Papers*, Rio de Janeiro – RJ, 2011. (ISBN 978-85-7650-297-5)
3. Chemical Reaction Engineering. Parameter Estimation, Exercises and Examples, M. Schmal e J.C. Pinto, CRC Press, Taylor & Francis, London, 2021. (ISBN 978-03-6749-446-9)
4. Experimental Design for the Joint Model Discrimination and Precise Parameter Estimation through Information Measures, A.L. Alberton, M. Schwaab, M.W. Lobão e J.C. Pinto, *Chemical Engineering Science*, 66, 9, 1940-1952, 2011. (<https://doi.org/10.1016/j.ces.2011.01.036>)
5. A Family of Kinetic Distributions for Interpretation of Experimental Fluctuations in Kinetic Problems, H. Pacheco, F. Thiengo, M. Schmal e J.C. Pinto, *Chemical Engineering Journal*, 332, 303-311, 2018. (<https://doi.org/10.1016/j.cej.2017.09.076>)
6. Diseño y análisis de experimentos, D.C. Montgomery, México DF, 2008. (ISBN 968-18-6154-6)

Datos del curso

Fecha de inicio y finalización: Dos clases semanales de 2.5 h cada una. Inicio: Mayo de 2026
Finalización: Julio de 2026.

Horario y Salón: a confirmar.

Arancel para estudiantes inscriptos en la modalidad educación permanente: 1800 U.I.
