

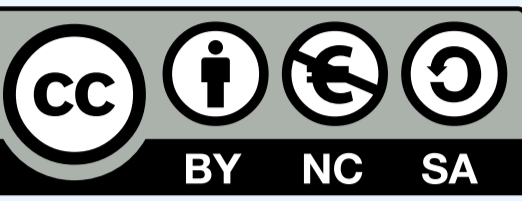
# Quimiometría con Orange paso a paso

## Ejemplos prácticos con datos químicos y espectros IR

Ángel Sánchez-Illana y David Pérez-Guaita

Departament de Química Analítica, Facultat de Química, Universitat de València, Dr. Moliner 50, 46100, Burjassot, España

Email: [angel.illana@uv.es](mailto:angel.illana@uv.es)



### Desafíos docentes

- Rechazo inicial frente a la programación
- Dificultad de desarrollar ejercicios prácticos durante la docencia en clase.
- Software propietario y de pago.

**Necesidad e interés en enseñar y practicar quimiometría y machine learning más allá de la teoría.**

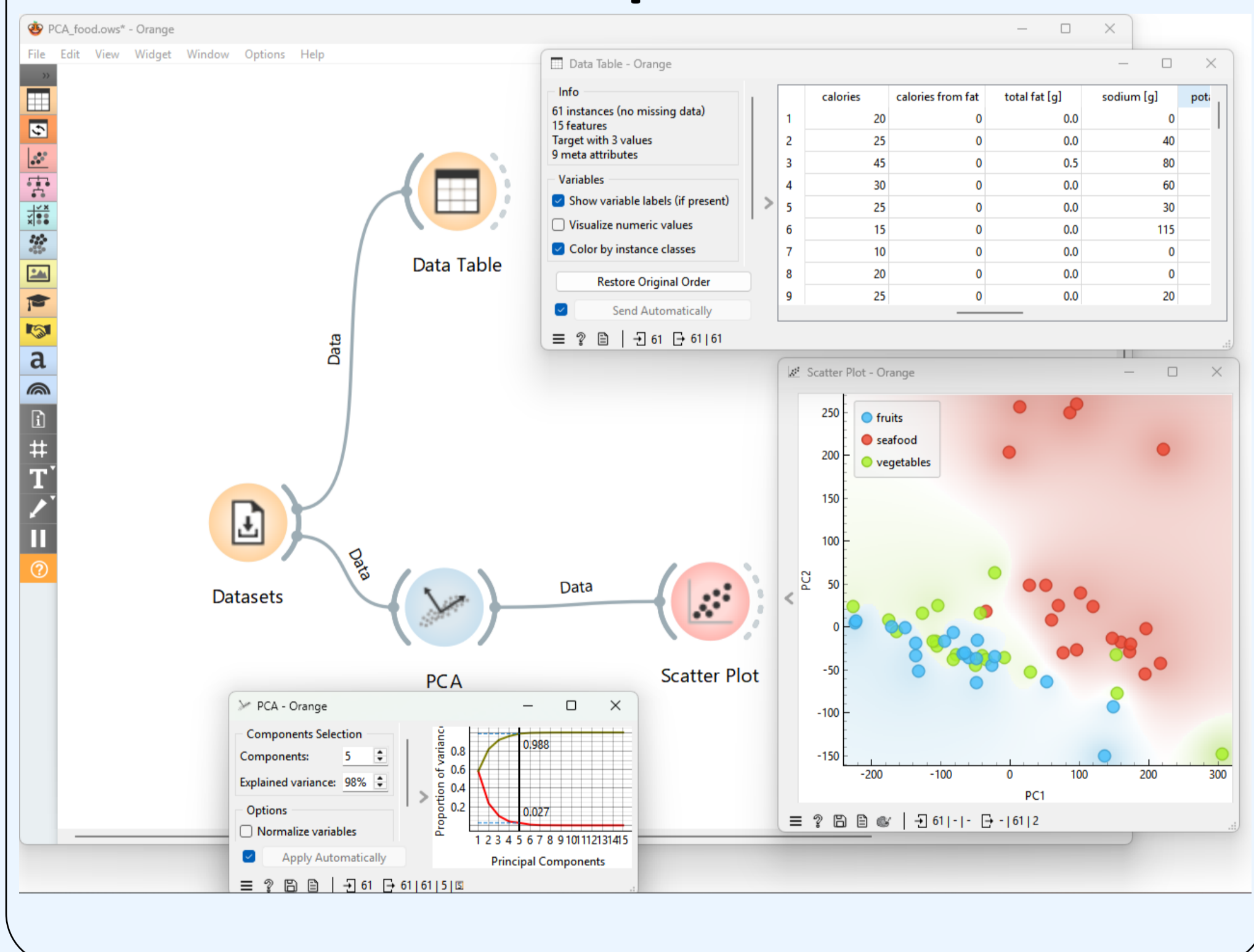
### ¿Qué es Orange?

Software de análisis de datos desarrollado en la Universidad de Liubiana (Eslovenia).

- ✓ Libre y gratuito
- ✓ Instalación sencilla
- ✓ Programar sin escribir código
- ✓ Incluye multitud de set de datos

Los análisis se conectando bloques funcionales llamados **widjets**. Cada widjet ejecuta una tarea concreta (importar datos, preprocesar, visualizar, modelizar, evaluar, predecir) y transmite su salida al siguiente bloque [1-2].

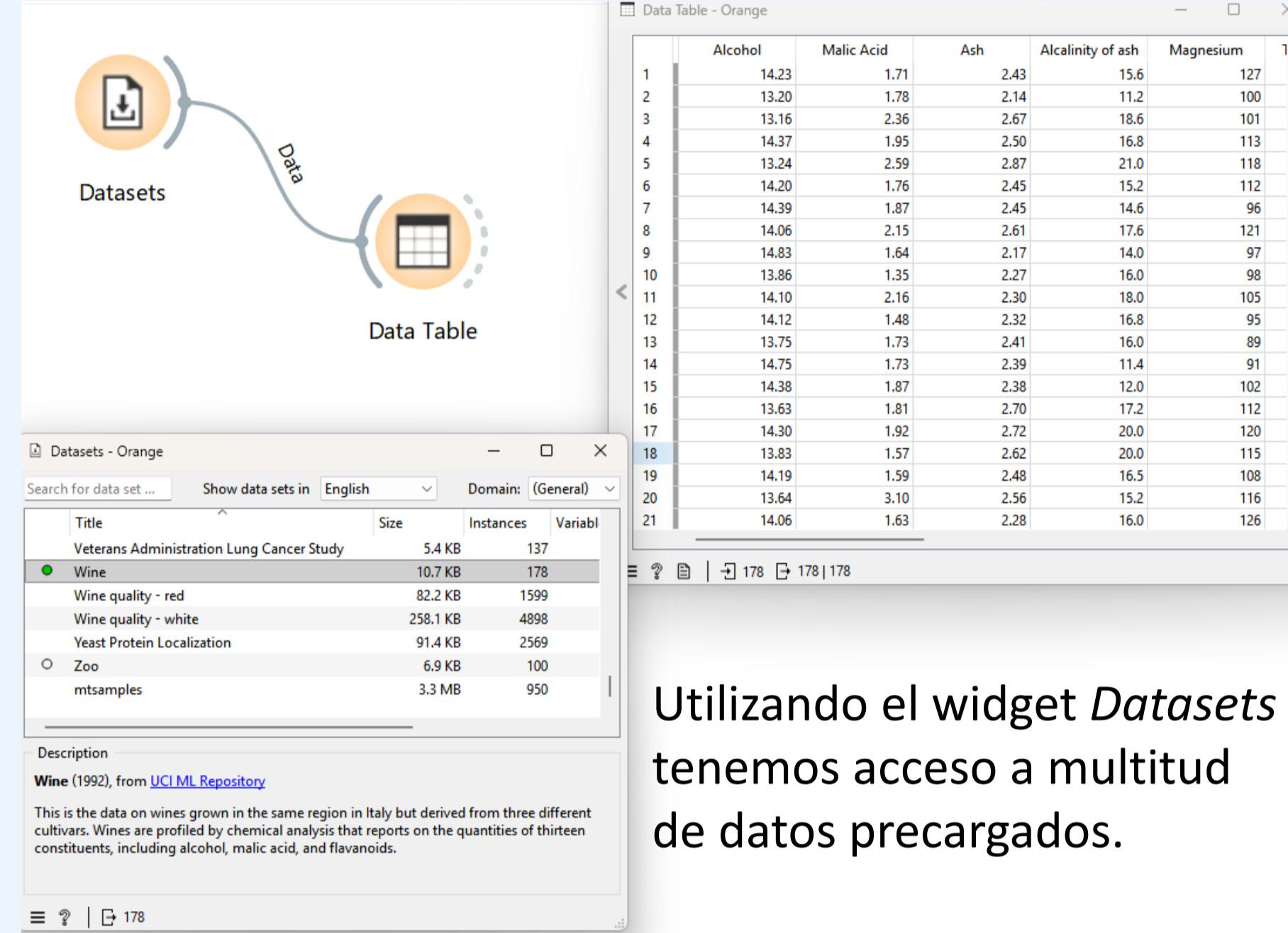
1. Arrastrar y soltar (**Drag & Drop**)
2. Conectar
3. Configurar
4. Ejecutar
5. Visualizar e interpretar



### Casos de estudio

#### A. Dataset wine

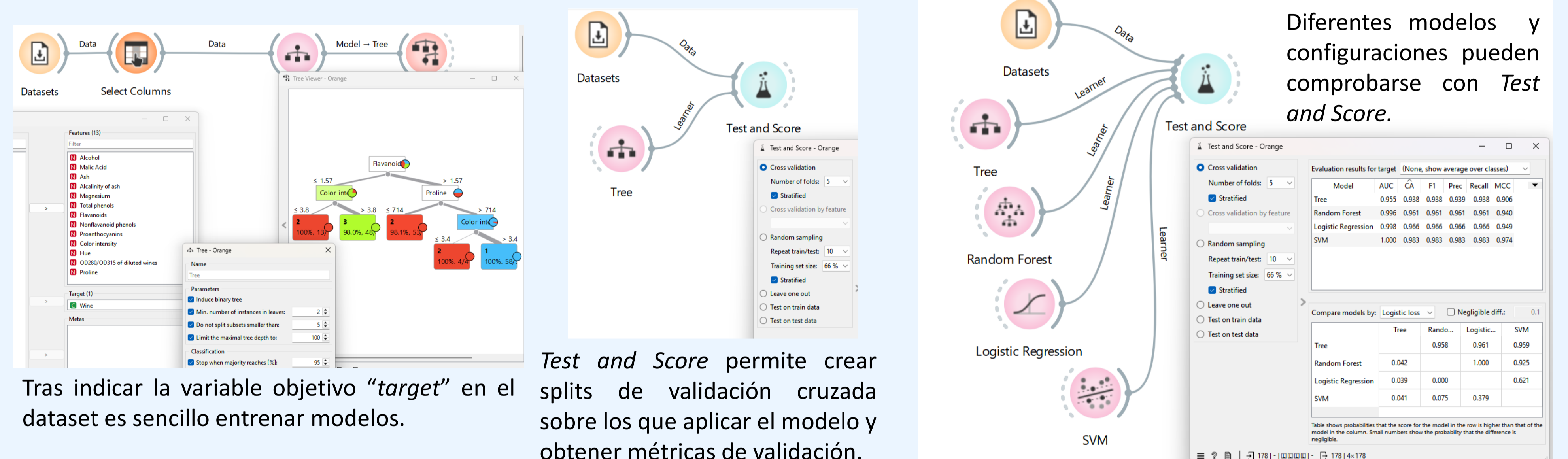
##### Visualización y estadística descriptiva



Utilizando el widget **Datasets** tenemos acceso a multitud de datos precargados.

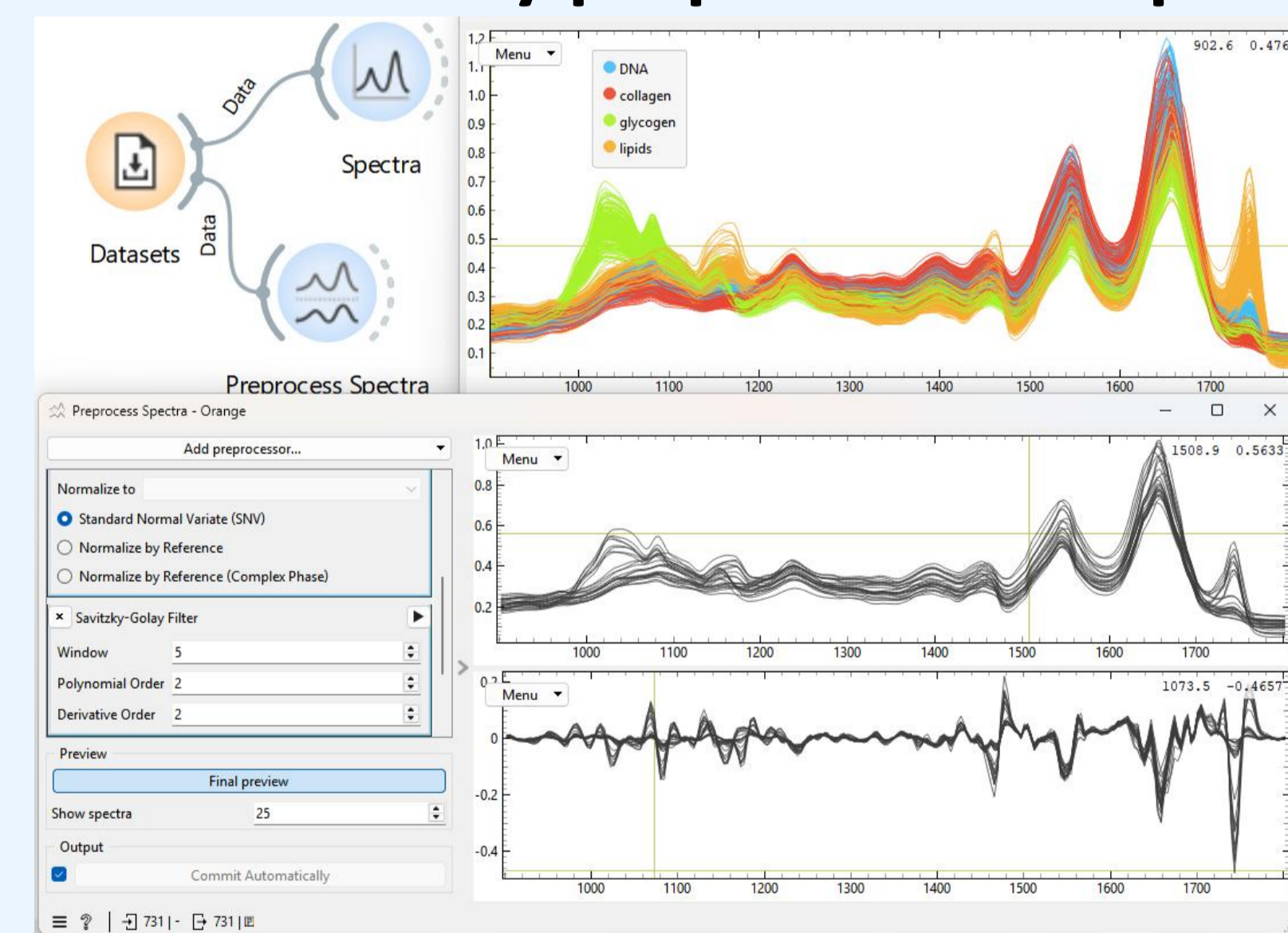
Con **File** importamos .csv, .xlsx...

##### Del árbol de decisión al Random Forest y uso de la validación cruzada (CV) para configurar, validar y comparar modelos supervisados

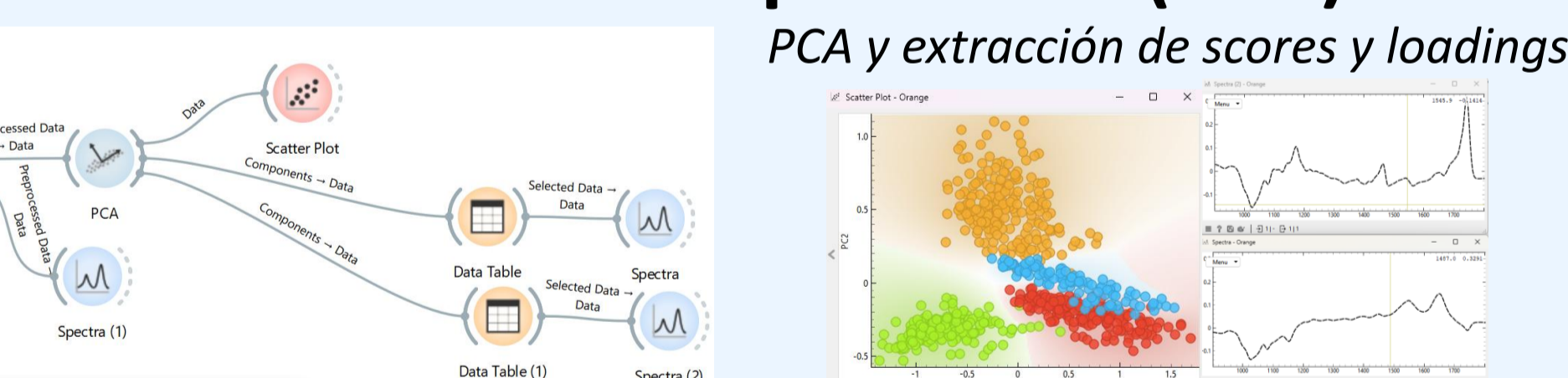


#### B. Datasets IR “collagen” y “proteins”

##### Visualización y preprocesado espectral



##### Modelización no supervisada (PCA)



##### Modelización supervisada (configurar y validar)



### Implementación y feedback del alumnado

- ✓ Utilizado en asignaturas de Grado y Másteres en nuestra Universidad desde el curso 2021/2022 hasta la actualidad [2-4].
- ✓ Las encuestas realizadas de forma sucesiva al alumnado muestran una tendencia sostenida hacia un mayor interés por la quimiometría tras la realización de ejercicios prácticos con Orange.

#### Referencias

[1]. <https://orangedatamining.com/>; [2]. Á. Sánchez-Illana, Actualidad Analítica 2023;84:16–21.; [3]. Á. Sánchez-Illana, In-Red Libro de Actas 2023, <https://doi.org/10.4995/INRED2023.2023.16679>.; [4]. Á. Sánchez-Illana, In-Red Libro de Actas 2024, <https://doi.org/10.4995/INRED2024.2024.18468>.

### Conclusión

- Utilizando el software Orange podemos trabajar de manera práctica quimiometría y ML en clase.
- Su uso mejora la comprensión y el interés de estos temas, reduciendo la brecha inicial entre programación y Química Analítica.

#### Agradecimientos

Vicerectorat de Formació Permanent, Transformació Docent i Ocupació de la Universitat del València por el proyecto PIEE 3899964.

