**EMPLEO DE DIFERENTES MATRICES DE DATOS CROMATOGRÁFICOS EN EL CÁLCULO DE MODELOS DE REGRESIÓN MULTIVARIADOS**

**Reinaldo Fernández Fernández, Ángel Dago Morales, Roberto Oropesa Rodríguez, Yumirka Comesaña García y Alicia Romero Hernández.**

*Centro de Investigación del Petróleo. Churruca No. 481, Cerro, La Habana, Cuba.*

*E-mail:* *reyn@ceinpet.cupet.cu*

**Resumen**

El desarrollo de un procedimiento alternativo mediante el empleo de datos cromatográficos y métodos de regresión multivariados es de gran utilidad para la predicción de propiedades físico químicas de combustibles en aplicaciones donde la disponibilidad de muestra es escasa. El objetivo del trabajo es desarrollar modelos de regresión tomando como variables dos matrices de datos diferentes: el cromatograma completo y el por ciento de área de los picos más representativos. En el análisis detallado de las gasolinas se empleó el método PIANO. Se utilizó como técnica de reconocimiento de patrones el análisis por componentes principales, el cual permitió detectar muestras anómalas. En el proceso de calibración se aplicaron los métodos de regresión de mínimos cuadrados parciales y de máquinas de vectores soporte. Los errores residuales medios de los modelos en las etapas de calibración y validación cruzada estuvieron acordes a la reproducibilidad del método estandarizado para el número de octano experimental (RON). Se destaca la utilización del perfil cromatográfico por tener menor tratamiento de la data experimental y similar poder de modelación.

Palabras claves: cromatografía gaseosa, modelos de regresión, número de octano experimental.