

AVISO IMPORTANTE – El Curriculum Vitae no podrá exceder de 4 páginas. Para rellenar correctamente este documento, lea detenidamente las instrucciones disponibles en la web de la convocatoria.

IMPORTANT – The Curriculum Vitae cannot exceed 4 pages. Instructions to fill this document are available in the website.

Fecha del CVA 12/12/2023

Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre	MARÍA SAGRARIO		
Apellidos	SÁNCHEZ PASTOR		
Dirección email	ssanchez@ubu.es	URL Web	https://www.ubu.es/unidad-de-investigacion-consolidada-uic-237-quimiometria-y-cualimetria
Open Researcher and Contributor ID (ORCID) (*)	0000-0001-7337-4773		

A.1. Situación profesional actual

Puesto	CAUN (Estadística e Investigación Operativa)		
Fecha inicio	26/10/2020		
Organismo/ Institución	Universidad de Burgos		
Departamento/ Centro	Departamento de Matemáticas y Computación /Facultad de Ciencias		
País	España	Teléfono	947258829
Palabras clave	<ul style="list-style-type: none">✓ Optimización multi-objetivo (varias respuestas, varios factores)✓ Inversión de modelos en variables latentes (LVMI)✓ Métodos de “inteligencia artificial” (algoritmos genéticos, redes neuronales) -<i>deep learning</i>✓ Diseño de experimentos (DOE)✓ AQbD: Calidad analítica diseñada✓ Control de procesos; Calidad por Diseño, Tecnología Analítica de Procesos;✓ Tipificación de productos alimentarios, detección de sustancias legalmente limitadas en alimentos destinados al consumo humano, detección y seguimiento de sustancias que migran del envase al alimento.		

A.2. Situación profesional anterior (incluye interrupciones en la carrera investigadora, de acuerdo con el Art. 14. b) de la convocatoria, indicar meses totales)

A.3. Formación Académica

Grado/Máster/Tesis	Universidad/País	Año
Licenciatura en Ciencias Matemáticas	Univ. Valladolid (España)	1991
Doctora en Matemáticas	Univ. Valladolid (España)	1997

(Incorporar todas las filas que sean necesarias)

Parte B. RESUMEN DEL CV (máx. 5000 caracteres, incluyendo espacios): **MUY IMPORTANTE:** se ha modificado el contenido de este apartado para progresar en la adecuación a los principios DORA. Lea atentamente las “Instrucciones para cumplimentar el CVA”

Actividad investigadora en quimiometría, ciencia que relaciona el estado de un proceso/sistema químico con las mediciones realizadas en él, y ello mediante la aplicación de métodos matemáticos y estadísticos con la finalidad de obtener datos adecuados y extraer de ellos la mejor información para tomar decisiones.

Esta actividad es de carácter **interdisciplinar** y se ha desarrollado en un grupo de investigación **multidisciplinar** con investigadores de Quím. Analítica y Estadística e IO que se ha financiado desde 1996 a través de proyectos de investigación nacionales y regionales y que es Unidad de Investigación Consolidada de Castilla y León (UIC237) desde junio de 2007 (renovada en abril de 2023 por 3 años más). Este grupo inter y multidisciplinar está



además bien correlacionado con el entorno: la Facultad de Ciencias donde sólo se imparten grados y másteres experimentales y la industria en Burgos, con grandes empresas de los sectores alimentario, químico y farmacéutico.

La investigación gira alrededor de la construcción de enfoques metodológicos para hacer frente a diferentes problemas analíticos. Se inició con el desarrollo de un nuevo algoritmo de aprendizaje de redes neuronales (*deep learning*) en clasificación, que se amplió para definir la capacidad de detección de un procedimiento analítico multivariante, y sirvió, a su vez, para la caracterización de vinos de alta calidad, o para brindar alternativas en el control de calidad de gasolinas o productos farmacéuticos.

El enfoque ha avanzado hacia métodos analíticos de detección de diferentes residuos o plaguicidas, lo que requiere el desarrollo de metodología tanto para el diseño de experimentos (DOE) como para el cálculo de modelos de calibración con datos de n vías. Mi principal contribución ha sido en el DOE, con métodos para definir diseños experimentales *ad-hoc*, ya sean bloqueados específicamente o casi ortogonales o diseños para mezclas, y en el desarrollo e implementación algorítmica de métodos para el estudio de múltiples respuestas en conflicto (aportando una alternativa a la función de deseabilidad).

Junto con la implementación algorítmica para su difusión práctica, los métodos se amplían para manejar múltiples criterios opuestos, incluidas herramientas de análisis y visualización para ayudar en la inspección del frente de Pareto de soluciones óptimas, que es un concepto clave en un entorno multiobjetivo o multirrespuesta. El frente óptimo de Pareto es una descripción de los compromisos necesarios entre objetivos en conflicto con la propiedad de que, a lo largo de él, ninguna respuesta puede mejorarse sin empeorar otra.

En el marco de análisis legalmente regulado, la ventaja de segundo orden de PARAFAC a la hora de descomponer señales obtenidas con instrumentos acoplados conduce a métodos para la detección de migrantes, aditivos, monómeros o sustancias añadidas sin intención (BU108A11-2, CTQ2014-53157-R), con diferentes contribuciones para la resolución de problemas en cromatografía mediante el uso de métodos de tres vías.

Los posteriores proyectos financiados competitivamente, CTQ2017-88894-R y BU012P17, se centran en el desarrollo de herramientas para la toma de decisiones con modelos basados en variables latentes, extendiendo la línea de investigación al marco de la Tecnología Analítica de Procesos (PAT) manteniendo la de seguridad alimentaria. La tesis doctoral de S. Ruiz, que codirigí, desarrolla una línea de inversión de modelos de variables latentes, dentro del control de procesos industriales implementando las iniciativas de Quality by Design (QbD) y PAT, con posterior definición del espacio de diseño.

El enfoque metodológico iniciado en esa tesis sirve de base para el desarrollo de métodos cromatográficos para la determinación de varios bisfenoles (algunos de ellos prohibidos en la UE) o la detección de triazinas en agua (con límites permitidos). Al mismo tiempo, se amplía la metodología de inversión para métodos de modelado de clases, campo en el que también se ha definido un nuevo índice para la optimización de múltiples *class-models*.

La actividad de investigación actual involucra el diseño de nuevos métodos cromatográficos, pero centrándose en la calidad de las señales ("las salidas"), para encontrar la región de diseño operable del método (MODR) donde varían "las entradas" sin que se modifique la calidad prefijada. El abordaje metodológico expuesto no puede hacerse de manera unilateral, es una tarea interdisciplinaria que debe realizarse en equipo, para definir los factores experimentales, las restricciones que impone el instrumento analítico o la matriz en estudio, para examinar críticamente el diseño experimental, los resultados experimentales o el ajuste de los modelos de predicción, que son el motor de cualquier implementación algorítmica.

Globalmente, 84 % de las publicaciones se encuentran en revistas JCR con factor de impacto Q1 en Q. Analítica o Estadística e IO, con $h=19$ (Scopus, 1120 citas) o $h=22$ (google académico, 1729 citas).

Parte C. LISTADO DE APORTACIONES MÁS RELEVANTES (últimos 10 años)- Pueden incluir publicaciones, datos, software, contratos o productos industriales, desarrollos clínicos, publicaciones en conferencias, etc. Si estas aportaciones tienen DOI, por favor inclúyalo.

C.1. Publicaciones más importantes en libros y revistas con “peer review” y conferencias (ver instrucciones).

AC: autor de correspondencia; (n.º x / n.º y): posición / autores totales

Si aplica, indique el número de citas y promedio por año

1. Publicación **Q1, libre acceso**

L. Valverde-Som, A. Herrero, C. Reguera, L.A. Sarabia, M.C. Ortiz (AC), M.S. Sánchez (6/6), **2024**, Model inversion and three-way decompositions in the analytical quality by design strategy for the determination of phthalates by HS-SPME-GC-MS, Talanta 267, 125265
<https://doi.org/10.1016/j.talanta.2023.125265>

2. Publicación **(Q1, libre acceso, 1 cita)**

M.C. Ortiz (AC), L.A. Sarabia, M. S. Sánchez (3/3), **2023**. The inversion of multiresponse partial least squares models, a useful tool to improve analytical methods in the framework of analytical quality by design, Analytica Chimica Acta 1276, 341620
<https://doi.org/10.1016/j.aca.2023.341620>

3. Publicación **(Q1, libre acceso, 5 citas)**

O. Valencia, M. C. Ortiz (AC), S. Ruiz, M. S. Sánchez, L.A. Sarabia (4/5), **2022**. Simultaneous class-modelling in chemometrics: A generalization of Partial Least Squares class modelling for more than two classes by using error correcting output code matrices, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 227, 104614
<https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2022.104614>

4. Publicación **(Q1, libre acceso, 9 citas)**:

Arce, M.M.; Sanlloriente, S.; Ruiz, S.; Sánchez, M.S.; Sarabia, L.A.; Ortiz, M.C. (AC); (4/6), **2021**. Method operable design region obtained with a partial least squares model inversion in the determination of ten polycyclic aromatic hydrocarbons by liquid chromatography with fluorescence detection, Journal of Chromatography A, 1657, 462577.
<https://doi.org/10.1016/j.chroma.2021.462577>

5. Publicación **(Q1, libre acceso, 2 citas)**:

Valencia, O.; Ortiz, M.C.(AC); Sánchez, M.S.; Sarabia, L.A.; (3/4), **2021**. A modified entropy-based performance criterion for class-modelling with multiple classes, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 217, 104423.
<https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2021.104423>

6. Publicación **(Q1, libre acceso, 6 citas)**:

Ortiz, M.C. (AC); Sarabia, L.A.; Herrero, A.; Reguera C.; Sanlloriente S; Arce MM; Valencia O; Ruiz S.; Sánchez, M.S., (9/9), **2021**. Partial least squares model inversion in the chromatographic determination of triazines in water, Microchemical Journal 164, 105971.
<https://doi.org/10.1016/j.microc.2021.105971>

7. Publicación **(Q1, libre acceso, 13 citas)**:

Arce, M.M.; Ruiz, S.; Sanlloriente, S.; Ortiz, M.C. (AC); Sarabia, L.A.; Sánchez, M.S. (6/6), **2021**. A new approach based on inversion of a partial least squares model searching for a preset analytical target profile. Application to the determination of five bisphenols by liquid chromatography with diode array detector, Analytica Chimica Acta 1149, 338217.
<https://doi.org/10.1016/j.aca.2021.338217>

8. Publicación **(Q1, 19 citas)**:

M.C. Ortiz (AC); S. Sanlloriente; A. Herrero; Reguera C; Rubio L; Oca ML; Valverde-Som L; Arce MM; Sánchez MS; Sarabia LA (9/10) **2020**. Three-way PARAFAC decomposition of chromatographic data for the unequivocal identification and quantification of compounds in a regulatory framework, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 200,104003.
<https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2020.104003>

9. Publicación **(Q1, 9 citas)**:

Ruiz, S.; Sarabia, L.A.; Ortiz, M.C (AC); Sánchez, M.S.; (4/4), **2020**. Residual spaces in latent variables model inversion and their impact in the design space for given quality characteristics, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 203 104040.
<https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2020.104040>



10. Publicación (**Q1, 9 citas**):

Ruiz, S.; Ortiz, M.C (AC); Sarabia, L.A.; Sánchez, M.S.(4/4); **2018**. A computational approach to partial least squares model inversion in the framework of the process analytical technology and quality by design initiatives. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 182 70-78. <http://dx.doi.org/10.1016/j.chemolab.2018.08.014>

C.2. Congresos, indicando la modalidad de su participación (conferencia invitada, presentación oral, póster)

1. ORAL: M.C. Ortiz, L.A. Sarabia, M.S. Sánchez, Partial Least Squares Model Inversion for Intervals, XI Colloquium Chemometricum Mediterraneum, Padua (Italia), 27-30 junio 2023.
2. PÓSTER: M.C. Ortiz, S. Ruiz, O. Valencia, L.A. Sarabia, Compliant class-models based on PLS2 to handle several categories encoded with error correcting output codes. XVIII Chemometrics in Analytical Chemistry international conference (CAC-2022), Roma (Italia), 29 agosto-2 septiembre de 2022.
3. Flash-communication: S. Ruiz; M.C. Ortiz; L.A. Sarabia; M.S. Sánchez, Inversion of Partial Least Squares for Class-Modelling to define discriminant boundaries in the input space. *X Colloquium Chemiometricum Mediterraneum*, Menorca (España), 12-14 junio 2019.
4. ORAL: S. Ruiz, M.C. Ortiz, L.A. Sarabia, M.S. Sánchez, Exploring the residual space when inverting a PLS model, 2018 Chemometrics in Analytical Chemistry international conference (CAC-2018), Halifax (Canadá) 25-29 junio 2018.
5. ORAL: S. Ruiz; M.C. Ortiz; L. Sarabia; M.S. Sánchez. A new approach to latent variable model inversion in the context of PAT and QbD. *IX Colloquium Chemiometricum Mediterraneum*. Université Aix Marseille. 2017. France.

C.3. Proyectos o líneas de investigación en los que ha participado, indicando su contribución personal. En el caso de investigadores jóvenes, indicar líneas de investigación de las que hayan sido responsables .

- 1 Ref.: BU052P20, Nuevos desarrollos metodológicos del diseño de experimentos para análisis químicos, bioquímicos y en tecnología analítica de procesos. Junta de Castilla y León. M.C. Ortiz. 2021- 2023. 264.000 €. Miembro de equipo.
- 2 Ref.: CTQ2017-88894-R, Nuevas herramientas quimiométricas con variables latentes para la toma de decisiones en tecnología analítica de procesos y en contextos regulados de seguridad alimentaria. Ministerio de Economía, Industria y Competitividad. M.C. Ortiz. 01/01/2018-31/07/2021. 68.970 €. Miembro de equipo.
- 3 Ref.: BU012P17, Herramientas quimiométricas para mejorar la toma de decisiones enmarcadas en la tecnología analítica de procesos y en seguridad alimentaria. Junta de Castilla y León. M.C. Ortiz. 2017-2019. 120.000 €. Miembro de equipo.
- 4 Ref.: CTQ2014-53157-R, Plataformas analíticas, basadas en la ventaja de Segundo orden, para abordar retos en análisis regulados de contaminantes, test de migración y estudios de degradación. Ministerio de Economía y Competitividad. M.C. Ortiz. 01/01/2015-30/06/2018. 101.640 €. Miembro de equipo.
- 5 Ref.: CTQ2011-26022, Desarrollo de métodos analíticos para residuos veterinarios, pesticidas y migrantes en alimentos de acuerdo con la normativa europea usando diseño de experimentos y PARAFAC. Ministerio de Economía y Competitividad. M.C. Ortiz. 01/01/2012-31/12/2014. 91.000 €.
- 6 Ref.: BU108A11-2, Diseño de experimentos y calibrados de n-vías basados en PARAFAC para manejar la información proporcionada por instrumentación acoplada. Desarrollo de métodos para el análisis de residuos veterinarios, pesticidas, monómeros y aditivos en alimentos, Junta de Castilla y León, M.C. Ortiz, 2011/2013. 30.000 €. Miembro del equipo.