

# UNIVERSIDAD DE BURGOS

## ESCUELA DE DOCTORADO

### TESIS DOCTORALES

**TÍTULO:** ESPACIO DE DISEÑO CON MÉTODOS DE INVERSIÓN DE MODELOS DE REGRESIÓN SO VARIABLES LATENTES.

**AUTOR:** RUIZ MIGUEL, SANTIAGO.

**PROGRAMA DE DOCTORADO:** CIENCIAS JURÍDICAS, ECONÓMICAS Y SOCIALES.

**ACTO Y FECHA DE LECTURA:** EL ACTO PÚBLICO DE DEFENSA DE TESIS SE DESARROLLARÁ EL DÍA 26 DE ENERO DE 2021, A LAS 10:00 HORAS, DE MANERA TELEMÁTICA MEDIANTE TEAMS

**DIRECTORES:** LUIS ANTONIO SARABIA PEINADOR  
MARÍA SAGRARIO SÁNCHEZ PASTOR

**TRIBUNAL:** PURIFICACIÓN GALINDO VILLARDÓN  
JESÚS ÁNGEL MARTÍN GONZÁLEZ  
JOSÉ MANUEL PRATS MONTALBÁN  
OLGA VALENCIA GARCÍA  
JESÚS MARÍA RODRÍGUEZ RODRÍGUEZ

**RESUMEN:** La tesis doctoral compendia el desarrollo de una metodología para la inversión de modelos de regresión sobre variables latentes dentro del marco del Control de Procesos, en el cual la Tecnología Analítica de Procesos (PAT) y la Calidad Diseñada (QbD) definen un contexto más allá del modelado matemático puro de un proceso. Se desarrolla una alternativa novedosa para la inversión de modelos predictivos del tipo PLS (Partial Least Squares) mediante un procedimiento computacional basado en algoritmos evolutivos. Se explora el impacto del espacio residual asociado a las variables predictoras sobre las soluciones obtenidas al invertir el modelo caracterizando así el espacio de diseño del proceso. Se aplica el procedimiento en la inversión de modelos de clase (respuesta cualitativa), para caracterizar los «objetos discriminantes» con valores fijos de sensibilidad y especificidad y por último se implementa su uso sistemático en el laboratorio químico, dentro de la denominada Calidad Analítica Diseñada (AQbD).

**Palabras clave:**

- Tecnología Analítica de Procesos – Process Analytical Technology (PAT)
- Calidad Diseñada – Quality by design (QbD)
- Mínimos Cuadrados Parciales – Partial Least Squares (PLS)
- Inversión de Modelos en Variables Latentes – Latent Variables Models Inversion (LVMI)
- Espacio de Diseño - Design Space