

**UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR**

BAHIA BLANCA ARGENTINA

DEPARTAMENTO DE: QUIMICA

PROGRAMA DE: QUIMIOMETRÍA

CÓDIGO: 6423

ÁREA NRO: III

PROFESORA RESPONSABLE

HORAS DE CLASE			
TEÓRICAS		PRÁCTICAS	
Por semana	Por cuatrimestre	Por semana	Por cuatrimestre
4	64	3	36

Dr. Mariano Garrido

ASIGNATURAS CORRELATIVAS PRECEDENTES

APROBADAS CURSADAS

Química Analítica Instrumental (6291)

**DESCRIPCION /OBJETIVOS**

La Quimiometría es la disciplina química que usa métodos matemáticos, estadísticos y de lógica formal para diseñar y seleccionar procedimientos experimentales óptimos y proveer la máxima información química relevante para analizar datos químicos.

Esta asignatura introduce al alumno en los conocimientos de técnicas quimiométricas y su uso para el trabajo analítico, lo que se traduce en una mejora de la Calidad de la información química.

El desarrollo de las aplicaciones quimiométricas ha contribuido a instaurar la Calidad en los laboratorios analíticos y constituye un apoyo imprescindible para todas las etapas del plan de actividades de la Garantía de Calidad.

El objetivo de esta asignatura es lograr que el alumno incorpore conceptos estadístico-matemáticos que le permitan resolver situaciones reales del laboratorio en lo referido al tratamiento de datos. El alumno deberá alcanzar un manejo de las herramientas quimiométricas que le permita informar resultados analíticos de calidad.

**PROGRAMA SINTÉTICO**

- TEMA 1: Quimiometría. Introducción a los errores en Química Analítica. Fundamentos del cálculo de probabilidad. Estadística descriptiva. Medidas de tendencia central. Medidas de dispersión. Distribución de probabilidad.
- TEMA 2: Introducción a la inferencia estadística. Poblaciones y muestra de mediciones. Tipos de muestreo. Estimación puntual. Estimación por intervalos de confianza.
- TEMA 3: Pruebas de hipótesis.
- TEMA 4: Pruebas no paramétricas.
- TEMA 5: Análisis de la varianza (ANOVA). Modelo de ANOVA de un factor.
- TEMA 6: Calibración lineal univariante. Regresión lineal. Correlación. Método de adiciones estándar. Regresión ponderada.
- TEMA 7: Diseño de experimentos. Estimación de efectos.
- TEMA 8: Análisis multivariante. Análisis de componentes principales. Regresión multivariante.
- TEMA 9: Errores en Química Analítica. Propiedades analíticas. Adquisición de señales y tratamiento de datos. Automatización y procesamiento de señales y datos analíticos. Validación de un proceso químico de medida.
- TEMA 10: Aspectos generales de la calidad en Química Analítica. Sistemas de calidad en los laboratorios analíticos. Control de la calidad en el proceso analítico. Evaluación de la calidad.

VIGENCIA AÑOS	2022					
---------------	------	--	--	--	--	--

**PROGRAMA ANALÍTICO**

TEMA 1: Introducción. Definición y objetivos de la Quimiometría. Introducción a los errores en Química Analítica. Teoría de probabilidad. Experimentos aleatorios. Eventos. Unión e intersección de eventos. Eventos mutuamente excluyentes e independientes. Probabilidad condicionada. Teorema de Bayes. Estadística descriptiva. Frecuencia absoluta, relativa y acumulativa. Histogramas. Medidas de tendencia central: media, mediana y moda. Medidas de dispersión: recorrido, varianza, desviación estándar, coeficiente de variación. Distribuciones de probabilidad.

TEMA 2: Introducción a la inferencia estadística. Poblaciones y muestras de mediciones. Definición de muestra. Tipos de muestreo. Estimación puntual. Estadístico, estimador y estimación. Propiedades de los estimadores. Estimación de parámetros en poblaciones normales. Distribuciones en el muestreo. Teorema Central del Límite. Estimación por intervalos de confianza. Intervalos de confianza. Tamaño de la muestra. Intervalos de confianza para la media y la varianza. Distribución t-student.

TEMA 3: Pruebas de hipótesis. Conceptos básicos. Tipos de errores. Nivel de significación. Pruebas de hipótesis referidas la media. Comparación de una media experimental con un valor conocido. Comparación de dos medias experimentales. Comparación de conjuntos de datos relacionados o apareados. Pruebas a una y dos colas. Pruebas de hipótesis referidas a la varianza. Test F. Datos anómalos o discrepantes.

TEMA 4: Pruebas no paramétricas. Introducción. Análisis inicial de datos. Contraste de rachas. Contraste de los signos. Contraste de Wilcoxon. Otros contrastes. Bondad del ajuste.

TEMA 5: Análisis de la varianza. Comparación de diversos conjuntos de resultados. Modelo de ANOVA de un factor. Estimación de las varianzas y sus significados. Pruebas de homoscedasticidad. Prueba de hipótesis. Descomposición de la varianza total en sus componentes. Tabla de ANOVA. Conclusiones analíticas.

TEMA 6: Calibración lineal univariante. Regresión lineal. Intervalos de confianza para la pendiente y la ordenada al origen. Estimación de parámetros de regresión. Predicción de la concentración desconocida mediante interpolación inversa y estimación de intervalos de confianza. Límites de detección. Coeficiente de correlación. Correlación y regresión. Método de adiciones estándar. Comparación de las pendientes de dos rectas de regresión. Validación del modelo lineal. Análisis de residuales. ANOVA aplicado a la regresión. Heteroscedasticidad. Rectas de regresión ponderadas. Comparación de resultados obtenidos por dos métodos diferentes a distintos niveles de concentración. Región de confianza conjunta para la pendiente y la ordenada al origen. Ajuste de Bonferroni.

TEMA 7: Diseño de experimentos. Definición y terminología. Objetivos del diseño de experimentos. Factores. Aleatorización y formación de bloques. ANOVA de dos factores. Interacciones. Diseño factorial. Diseño de uno o más factores. Estimación de efectos.

TEMA 8: Análisis multivariante. Introducción. Análisis de componentes principales (PCA). Análisis de agrupaciones. Calibración multivariante. Regresión lineal múltiple (MLR). Regresión en componentes principales (PCR). Regresión en mínimos cuadrados parciales (PLS).

TEMA 9: Errores en Química Analítica. Tipos de errores: errores aleatorios y sistemáticos. Propagación de errores. Exactitud: Veracidad y precisión. Sesgo. Propiedades analíticas. Exactitud. Representatividad. Precisión. Linealidad. Selectividad. Sensibilidad. Límite de detección. Propiedades analíticas complementarias. Robustez. Trazabilidad e incertidumbre. Etapas del proceso de medida químico. Adquisición de señales y tratamiento de datos. Automatización y procesamiento de señales y datos analíticos. Validación de un proceso de medida químico. Adecuación al propósito (fitness for purpose).

TEMA 10: Aspectos generales de la calidad en Química Analítica. Tipos de calidad. Calidad y propiedades analíticas. Calidad y problema analítico. Sistemas de calidad en los laboratorios analíticos. Elementos de la garantía de calidad. Buenas prácticas de laboratorio. Control de la calidad en el proceso analítico. Gráficos de control. Evaluación de la calidad. Acreditaciones y pruebas de aptitud.

**PROGRAMA DE TRABAJOS PRACTICOS**

Los alumnos resolverán problemas que simulan situaciones reales del laboratorio en lo concerniente a la obtención de datos. Esta información analítica deberá ser procesada mediante las herramientas estadístico-matemáticas que propone la Quimiometría con el objeto de obtener un resultado expresado con la correspondiente incertidumbre, para el nivel de significancia elegido. Además el alumno deberá realizar una interpretación de estos resultados desde el punto de vista analítico.

De esta manera, el alumno podrá hacer un análisis teórico integral del procedimiento del laboratorio y comprender el significado de dar un resultado analítico de calidad.

Los alumnos contarán con una guía de problemas impresa y tendrán acceso a computadoras y software apropiado para el procesamiento de datos.

**METODOLOGÍA DE LA ENSEÑANZA**

Las técnicas docentes utilizadas en el desarrollo de la asignatura son:

- Clases académicas teóricas (clases magistrales)
- Clases académicas prácticas (resolución de problemas y manejo de software)
- Exposición y debate.

Todas las clases teóricas se dictan en sesiones académicas con presencia del profesor responsable de la asignatura.

El desarrollo de las clases de trabajos prácticos comprende sesiones de resolución de problemas con presencia de un auxiliar de docencia y/o el profesor responsable de la asignatura.

Además, durante el desarrollo de las clases prácticas el alumno aprenderá el manejo de algunos programas específicos como herramienta para el tratamiento de datos. Las clases se desarrollan en el gabinete de computación.

Algunos temas se trabajarán en forma de seminarios, con exposiciones orales y posterior debate, siempre con la coordinación del profesor a cargo de la asignatura.

**FORMA DE EVALUACIÓN**

- La evaluación de la asignatura se realiza a través de dos exámenes de cursado-promoción que involucran tanto contenidos teóricos como resolución práctica de problemas.
- La nota máxima de cada examen será de 100 (cien) puntos.
- Aquellos alumnos que sumen 140 (ciento cuarenta) o más puntos entre los dos exámenes, promocionarán la asignatura sin necesidad de rendir examen final.
- Aquellos alumnos que sumen entre 100 (cien) y 139 (ciento treinta y nueve) puntos cursarán la materia, pero para aprobar la asignatura deberán aprobar un examen final teórico.
- Aquellos alumnos que sumen menos de 100 (cien) puntos entre los dos exámenes deberán recursar la asignatura.
- Nota: En el segundo examen, el alumno no deberá obtener una calificación menor de 40 (cuarenta) puntos para poder cursar la asignatura.
- Las clases prácticas son obligatorias. Los alumnos deberán acreditar un 80 % de asistencia a las mismas.
- Se realizará además una evaluación continua del proceso de aprendizaje del alumno teniendo en cuenta particularmente la participación y la responsabilidad respecto a las tareas encomendadas por el docente.

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR

6/6

BAHIA BLANCA

ARGENTINA

DEPARTAMENTO DE: QUIMICA

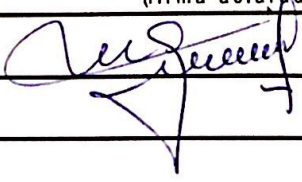
PROGRAMA DE: QUIMIOMETRÍA

CÓDIGO: 6423

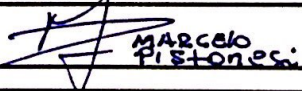
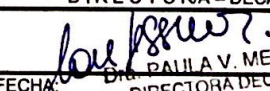
ÁREA NRO: III

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- R. E. Walpole, R. H. Myers, Probabilidad y estadística, Pearson Educación, 2012
- J. N. Miller, J. C. Miller, Estadística y Quimiometría para Química Analítica, 4ª Ed. Editorial Prentice-Hall, Madrid, 2000.
- D. L. Massart, B. G. M. Vandeginste, L. M. C. Buydens, S. de Jong, P. J. Lewi, J. Semyers-Verbeke. Handbook of Chemometrics and Qualimetrics: Part A. Editorial Elsevier, Amsterdam, 1998.
- R.G. Brereton, Chemometrics: multivariate statistical analysis of analytical chemical and biomolecular data. Chemometrics and Cheminformatics in Aquatic Toxicology. Wiley Online Library. 2021
- R.G. Brereton, Chemometrics: data driven extraction for science. John Wiley & Sons, 2018.
- I. Espejo Miranda, F. Fernández Palacín, M. A. López Sánchez, M. Muñoz Márquez, A. M. Rodríguez Chia, A. Sánchez Navas, C. Valero Franco, Inferencia Estadística, Servicio de publicaciones Universidad de Cádiz, Cádiz, 2002.
- C. Ochoa Sangrador, M. Molina Arias, y E. Ortega Páez. "Inferencia estadística: contraste de hipótesis." Evid Pediatr 16 (2020): 11.
- W. F. Pickering, Química Analítica Moderna. Reverté, 2021.
- M. Valcárcel, Principios de Química Analítica, Editorial Springer-Verlag Ibérica, Barcelona, 1999.
- M. Valcárcel, M. S. Cárdenas, Automatización y miniaturización en Química Analítica, Editorial Springer-Verlag Ibérica, Barcelona, 2000.
- R. Cela y otros., Avances en Quimiometría Práctica, Ed. Universidade de Santiago de Compostela, Santiago de Compostela, 1994.
- M. Blanco, V. Cerdà, Quimiometría, Ed. Serveis de Publicacions de la Universitat Autònoma de Barcelona, Barcelona, 1988.

AÑO	PROFESORA RESPONSABLE (firma aclarada)	AÑO	PROFESORA RESPONSABLE (firma aclarada)
2022			

VISADO

COORDINADORA ÁREA	SECRETARÍA ACADÉMICA/A	DIRECTORA - DECANO/A
 MARCIO Pistonesi	Dr. PABLO G. DEL ROSSO SECRETARIO ACADÉMICO	 Dra. PAULA V. MESSINA
FECHA:	FECHA DEPTO. DE QUIMICA	FECHA DEPTO. DE QUIMICA