FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES
Universidad Nacional de La Pampa

RESOLUCIÓN Nº 401

SANTA ROSA, 13 de Noviembre de 2015.-

VISTO:

El Expte. Nº 583/15, iniciado por el Departamento de Química - Directora, s/eleva programa de la asignatura "QUIMIOMETRÍA" (Licenciatura en Química – Plan 2012); y

CONSIDERANDO:

Que el Dr. José Manuel CAMIÑA, docente a cargo de la cátedra "QUIMIOMETRÍA", que se dicta para la carrera Licenciatura en Química, eleva programa de la citada asignatura para su aprobación a partir del ciclo lectivo 2015.

Que el mismo cuenta con el aval de la Dra. Mónica BELLOZAS REINHARD, docente de espacio curricular afín, y el de la Mesa de Carrera de la Licenciatura en Química.

Que en la sesión ordinaria del día 12 de Noviembre de 2015 el Consejo Directivo aprobó, por unanimidad, el despacho de la Comisión de Enseñanza que aconseja aprobar el Proyecto de Resolución presentado por Decanato.

POR ELLO:

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

RESUELVE:

ARTÍCULO 1º: Aprobar el Programa de la asignatura "QUIMIOMETRÍA" correspondiente a la carrera Licenciatura en Química (Plan 2012), a partir del ciclo lectivo 2015, que como Anexos I, II, III, IV, V, VI y VII forma parte de la presente Resolución.

ARTÍCULO 2º: Regístrese, comuníquese. Dése conocimiento a Secretaría Académica, a los Departamentos Alumnos, de Química, al Dr. José Manuel CAMIÑA y al CENUP. Cumplido, archívese.

Mg.Ing. Pablo Marcelo GARCIA
SECRETARIO ACADEMICO
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales
UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PAMPA

Lic. Graciela Lorna ALFONSO
PRESIDENTE CONSEJO DIRECTIVO
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales
Universidad Nacional de La Pampa

CORRESPONDE AL ANEXO I DE LA RESOLUCIÓN Nº 401/15

ANEXO I

DEPARTAMENTO DE: QUÍMICA

ACTIVIDAD CURRICULAR: QUIMIOMETRÍA

CARRERA - PLAN: LICENCIATURA EN QUÍMICA – PLAN 2012

CURSO: TERCER AÑO

RÉGIMEN: CUATRIMESTRAL – DESARROLLO: 10/08 al 28/11

CARGA HORARIA SEMANAL: Teórico-Práctico: 6 HORAS SEMANALES

CARGA HORARIA TOTAL: 90 HORAS

CICLO LECTIVO: 2015

EQUIPO DOCENTE:

- Dr. José Manuel CAMIÑA: Profesor Adjunto Interino Dedicación Exclusiva a/c:
- Dr. Miguel Ángel CANTARELLI: Jefe de Trabajos Prácticos Interino Dedicación Exclusiva.
- Dra. Marianela SAVIO. Jefe de Trabajos Prácticos Interino Dedicación Simple. Asignación de funciones.
- Lic. Silvana Mariela AZCARATE. Ayudante de Primera Interino Dedicación Simple. Asignación de Fuinciones.

FUNDAMENTACION:

El análisis de datos químicos requiere necesariamente del conocimiento, aplicación e interpretación de herramientas estadísticas a los fines de informes y/o validación de resultados. Así mismo, la participación del licenciado en química en cada una de las etapas del análisis, incluyendo el muestreo, resulta crucial para un adecuado diseño de experimentos. En este sentido, el conocimiento y aporte del licenciado en química resulta de vital importancia para la resolución de problemas analíticos de pequeña o gran escala, los cuáles pueden tener un impacto profundo a nivel social, económico, ambiental, etc.

CORRESPONDE AL ANEXO I DE LA RESOLUCIÓN Nº 401/15

Es por ello que la asignatura Quimiometría, pretende capacitar y formar al estudiante, otorgando las herramientas estadísticas, así como los criterios básicos, cubriendo aspectos relevantes con vistas a su futura actividad profesional.

OBJETIVOS Y/O ALCANCES DE LA ASIGNATURA

- Realizar la interpretación estadística de datos provenientes de análisis químico.
- Conformar equipos multidisciplinarios para el diseño y análisis estadístico de problemas ambientales.
- Desarrollar diseños experimentales para la resolución de problemas de índole química.
- Validar estadísticamente resultados analíticos.
- Desarrollar modelos estadísticos para la cuantificación de especies de interés.
- Comparar estadísticamente resultados analíticos.
- Realizar el control estadístico de calidad en productos manufacturados.
- Desarrollar diseños de muestreo estadístico para una amplia gama de muestras.

Mg.Ing. Pablo Marcelo GARCIA
SECRETARIO ACADEMICO
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales
UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PAMPA

Lic. Graciela Lorna ALFONSO
PRESIDENTE CONSEJO DIRECTIVO
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales
UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PAMPA

CORRESPONDE AL ANEXO II DE LA RESOLUCIÓN Nº 401/15

ANEXO II

ASIGNATURA: QUIMIOMETRÍA

CICLO LECTIVO: 2015

PROGRAMA ANALÍTICO

UNIDAD 1

Introducción al Tratamiento de los datos analíticos. Quimiometría. Objetivos. Algunas consideraciones históricas. Los errores en la medición. Precisión y exactitud. Error absoluto y error relativo. Tipos de errores en los resultados analíticos: errores sistemáticos y errores aleatorios. Propagación de errores aleatorios y sistemáticos. Cifras significativas. Repetitividad y reproducibilidad. Discusión de conceptos. Esquema conceptual para el tratamiento de los datos analíticos.

UNIDAD 2

Descripción estadística de la calidad de los procesos analíticos y de las mediciones. Concepto de población y muestra. Organización, presentación y resumen de datos. Tablas de frecuencias. Representaciones gráficas. Histogramas y distribuciones. Diagrama de caja o box-plot. Ejemplos de aplicación.

UNIDAD 3

El proceso analítico total. Química analítica básica. Garantía de calidad y control de calidad. Evaluación de la calidad. Variabilidad de las mediciones. Verificación y validación. Relación exactitud-productividad en los laboratorios analíticos.

UNIDAD 4

Medidas Descriptivas. Medidas de tendencia central. Medidas de dispersión o de variabilidad. Usos y ejemplificación. Criterio de rechazo de valores dudosos en función del número de observaciones. Prueba Q de Dixon. Prueba de Grubbs.

UNIDAD 5

Distribuciones de variables aleatorias. Concepto de probabilidad, experimento aleatorio, espacio muestral y suceso. Distribuciones de probabilidad para variables discretas y continuas. Distribución Binomial y Poisson. Aplicación a problemas concretos. Distribución Normal. Función F. Función t-Student. Función χ^2. Prueba de la normalidad de una distribución. Su aplicación a la resolución de problemas concretos.

CORRESPONDE AL ANEXO II DE LA RESOLUCIÓN Nº 401/15

Distribución muestral de la media. Intervalos de confianza para el promedio. Límites de confianza. Cálculo de probabilidades utilizando función normalizada z. Tablas de probabilidades. Nivel de significancia. Error de tipo I. Error de tipo II. Poder del test. Tamaño de la muestra. Pruebas de uno y dos lados.

UNIDAD 6

Tratamiento estadístico de datos analíticos. Aplicaciones al control de calidad. Pruebas de hipótesis. Elaboración de una prueba de significancia. Definición de pruebas paramétricas y no paramétricas. Criterios de aceptación o rechazo de hipótesis. Evaluación del sesgo de un procedimiento usando prueba t: el caso de una muestra, el de dos muestras y el de dos muestras relacionadas (pareadas). Varianza conjunta. Prueba de Cochran. Comparación de varianzas. Prueba F. Usos de los intervalos de confianza. Presentación de resultados de una prueba de hipótesis.

UNIDAD 7

Muestreo estadístico. Plan de muestreo. Muestreo por atributos y por variables. Tipos de muestreo: aleatorio simple, aleatorio estratificado, sistemático y selectivo. Muestreo exploratorio. Efecto del muestreo en el resultado final.

UNIDAD 8

Control de calidad. Control interlaboratorio. Definición de puntos críticos de control. Medidas preventivas y correctoras. Gráficos de control estándar de medias y amplitudes (Shewart). Límites de control. Cartas para el laboratorio analítico. Diseño y evaluación de ensayos colaborativos. Cartas de sumas acumulativas (cusum).

UNIDAD 9

Comparación de diversos conjuntos de resultados. Análisis de la varianza (ANOVA) de un factor. Terminología y ejemplos. Condiciones para la utilización de ANOVA. Estimación de las varianzas y sus significados. ANOVA de un factor de efecto fijo y efecto aleatorio. Descomposición de la varianza total en sus componentes. Varianza de comparación. Tabla de ANOVA. Pruebas de Bartlett y Levene para comparación de más de dos varianzas. Conclusiones analíticas que surgen de ANOVA.

UNIDAD 10

Calibración lineal univariante. Regresión y correlación. Gráficas de calibración en análisis instrumental. Estimación de los parámetros de regresión. Análisis de residuos. Desviación estándar del ajuste lineal, de la pendiente y la ordenada al origen. Hipérbolas de confianza. Validación del modelo establecido. Predicción de la concentración desconocida mediante interpolación inversa y estimación del intervalo de confianza.

CORRESPONDE AL ANEXO II DE LA RESOLUCIÓN Nº 401/15

Comparación de de dos métodos analíticos por regresión lineal. Cifras de mérito: sensibilidad, sensibilidad analítica, límite de detección (LOD), límite de cuantificación (LOQ), rango lineal, rango dinámico.

UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PAMPA

Lic. Graciela Lorna ALFONSO
PRESIDENTE CONSEJO DIRECTIVO
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales

FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES
Universidad Nacional de La Pampa

CORRESPONDE AL ANEXO III DE LA RESOLUCIÓN Nº 401/15

ANEXO III

ASIGNATURA: QUIMIOMETRÍA

CICLO LECTIVO: 2015

BIBLIOGRAFÍA:

1. Ramis Ramos, G. y García Alvarez-Coque, M.C. "Quimiometría". Editorial Síntesis S. A. Madrid. España. 2001.
2. Miller, J.C. y Miller, J.N. "Estadística y Quimiometría para Química Analítica", 4ª ed. Pearson Educación S.A. Madrid. España. 2002.
3. Cámara, C. (ed.), Fernandez, P., Martín-Esteban, A. y Pérez-Conde, C. Toma y tratamiento de muestras. Editorial Síntesis. Madrid. España. 2004.
4. Danzer, K. Analytical Chemistry. Theoretical and Metrological Fundamentals. Springer-Verlag. Berlin. Germany. 2007.
5. Brereton, R. G. Applied Chemometrics for Scientist. John Wiley & Sons. Chischester. England. 2007.
6. Mongay Fernandez, C. Quimiometría. Publicaciones Universidad de Valencia. Valencia. España. 2005.
7. Massart, D.L., Vandeginste, B.G.M., Buydens, L.M.C., de Jong, S., Lewi, P.J., Smeyers-Verbeke, J. "Handbook of Chemometrics and Qualimetrics: Part A and B", Elsevier. Amsterdam. The Netherlands. 1997.
8. Johnson, R. "Estadística Elemental". Grupo Editorial Iberoamérica. México. 1994.
9. Cela, R. (editor). "Quimiometría Práctica". Ed. Universidad de Santiago de Compostela. España. 1994.
10. Meier, P., Zünd, R. E. Statistical Methods in Analytical Chemistry. 2nd edition. Ed. Wiley & Sons. Toronto. Canada. 2000.
11. Prichard, E., Barwick, V. Quality Assurance in Analytical Chemistry. Ed. Wiley & Sons. Chichester. England. 2007.
12. Otto, M. "Chemometrics: Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry". Ed.Wiley-VCH. Germany, 1999.
13. Adams, M.J. "Chemometrics in Analytical Spectroscopy". The Royal Society of Chemistry. London. England. 1995.
14. Valcárcel, M. y Rios, A. "La calidad en los laboratorios analíticos". 1ª. Ed. Reverté S.A. Barcelona. España. 1992.
15. Skoog, D., West, D., y Holler J. "Química Analítica". 6ª. Ed. Mc. Graw-Hill. México. 1995.
16. Harris, D.C. "Análisis Químico Cuantitativo". 3ª Ed. Grupo Editorial Iberoamérica. México. 1992.

Mg.Ing. Pablo Marcelo GARCIA
SECRETARIO ACADEMICO
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales
UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PAMPA

Lic. Graciela Lorna ALFONSO
PRESIDENTE CONSEJO DIRECTIVO
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales
UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PAMPA

CORRESPONDE AL ANEXO IV DE LA RESOLUCIÓN Nº 401/15

ANEXO IV

ASIGNATURA: QUIMIOMETRÍA

CICLO LECTIVO: 2015

PROGRAMA DE TRABAJOS PRÁCTICOS:

Trabajo Práctico Nº 1: Errores en el análisis cuantitativo.

Trabajo Práctico Nº 2: Tratamiento de datos analíticos.

Trabajo Práctico Nº 3: Distribución normal y límites de confianza.

Trabajo Práctico Nº 4: Pruebas de significación.

Trabajo Práctico Nº 5: Cartas de control

Trabajo Práctico Nº 6: Análisis de la varianza (ANOVA) de un factor.

Trabajo Práctico Nº 7: Errores en el Análisis Instrumental. Regresión y correlación.

Mg.Ing. Pablo Marcelo GARCIA
SECRETARIO ACADEMICO
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales
UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PAMPA

Lic. Graciela Lorna ALFONSO
PRESIDENTE CONSEJO DIRECTIVO
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales
UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PAMPA

CORRESPONDE AL ANEXO V DE LA RESOLUCIÓN Nº 401/15

ANEXO V

ASIGNATURA: QUIMIOMETRÍA

CICLO LECTIVO: 2015

ACTIVIDADES ESPECIALES QUE SE PREVÉN

No se prevén actividades especiales.

Mg.Ing. Pablo Marcelo GARCIA
SECRETARIO ACADEMICO
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales
UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PAMPA

Lic. Graciela Lorna ALFONSO
PRESIDENTE CONSEJO DIRECTIVO
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales
UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PAMPA

CORRESPONDE AL ANEXO VI DE LA RESOLUCIÓN Nº 401/15

ANEXO VI

ASIGNATURA: QUIMIOMETRÍA

CICLO LECTIVO: 2015

PROGRAMA DE EXAMEN

Corresponde al programa analítico.

Mg.Ing. Pablo Marcelo GARCIA
SECRETARIO ACADEMICO
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales
UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PAMPA

Lic. Graciela Lorna ALFONSO
PRESIDENTE CONSEJO DIRECTIVO
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales
UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PAMPA

CORRESPONDE AL ANEXO VII DE LA RESOLUCIÓN Nº 401/15

ANEXO VII

ASIGNATURA: QUIMIOMETRÍA

CICLO LECTIVO: 2015

METODOLOGIA DE EVALUCION Y/O OTROS REQUERIMIENTOS:

- Dos exámenes parciales escritos para su regularización con sus respectivos recuperatorios e integral.

- Examen final (oral o escrito) para su aprobación

Mg.Ing. Pablo Marcelo GARCIA
SECRETARIO ACADEMICO
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales
UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PAMPA

Lic. Graciela Lorna ALFONSO
PRESIDENTE CONSEJO DIRECTIVO
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales
UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PAMPA