

FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES

Universidad Nacional de La Pampa

RESOLUCIÓN N° 302

SANTA ROSA, 20 de mayo de 2022

VISTO:

El Expte. N° 301/22, iniciado por Secretaría Académica, s/eleva programas correspondientes a la carrera Licenciatura en Química - Plan 2021; y

CONSIDERANDO:

Que el docente Dr. José Manuel CAMIÑA, 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 2023.

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

Que en la sesión ordinaria del día 19 de mayo de 2022, el Consejo Directivo aprobó, Sobre Tablas, por unanimidad 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 2021), a partir del ciclo lectivo 2023, que como Anexos I, II, III, IV, V, VI y VII forma parte de la presente Resolución.

ARTÍCULO 2º: Regístrese, comuníquese. Pase a conocimiento de Secretaría Académica, Departamento de Asuntos Estudiantiles, Departamento de Química, del Dr. José Manuel CAMIÑA y del CENUP. Cumplido, archívese.



CORRESPONDE A LA RESOLUCIÓN N° 302/22

ANEXO I

DEPARTAMENTO DE: QUÍMICA

ACTIVIDAD CURRICULAR: QUIMIOMETRÍA

CARRERA/S - PLAN: Licenciatura en Química – Plan 2021

CURSO: 3º año

RÉGIMEN: Cuatrimestral – Desarrollo: Segundo cuatrimestre

CARGA HORARIA SEMANAL:

● **Teórico-Práctico: 4 horas semanales**

CARGA HORARIA TOTAL: 60 horas

CICLO LECTIVO: A partir de 2023

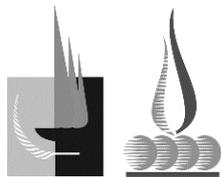
EQUIPO DOCENTE DE LA CÁTEDRA:

Dr. José Manuel CAMIÑA: Profesor Adjunto Regular Dedicación Exclusiva a/c.

Dr. Miguel Ángel CANTARELLI: Jefe de Trabajos Prácticos Interino Dedicación Exclusiva.

FUNDAMENTACIÓN

En el análisis estadístico de datos químicos, se requiere del conocimiento, aplicación e interpretación de herramientas estadísticas a los fines de informes de resultados, así como para la validación de los mismos. En este sentido, la participación del/la licenciado/a en química en cada una de las etapas del análisis, incluyendo el muestreo, resulta crucial para un adecuado diseño de los experimentos a desarrollar, habida cuenta que el/la licenciado/a en química es el responsable de la emisión de los resultados, los cuales son avalados a través de su firma. Por tal motivo, el conocimiento y aporte del/la egresado/a 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.



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES

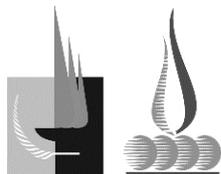
Universidad Nacional de La Pampa

CORRESPONDE AL ANEXO I DE LA RESOLUCIÓN N° 302/22

Por ello, la asignatura Quimiometría tiene la intención capacitar y formar al/la estudiante a través de saberes vinculados al uso de las herramientas estadísticas necesarias para su futuro quehacer profesional, 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.
- Diseñar y realizar muestreos basados en análisis estadístico
- Emitir informes de resultados de análisis químicos realizados con base estadística.
- Conformar equipos multidisciplinarios para el diseño y análisis estadístico de problemas ambientales, con base en el conocimiento de las propiedades analíticas.
- Intervenir en forma directa en el diseño de experimentos para la resolución de problemas de índole química, basado en propiedades analíticas aspectos estadísticos.
- Validar e interpretar 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.



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES

Universidad Nacional de La Pampa

CORRESPONDE A LA RESOLUCIÓN N° 302/22

ANEXO II

ASIGNATURA: QUIMIOMETRÍA

CICLO LECTIVO: A partir de 2023.

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

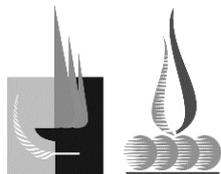
El proceso analítico total. Química analítica básica. Garantía de calidad y control de calidad. Evaluación de la calidad. Variabilidad de las mediciones. Verificación y validación. Relación exactitud-productividad en los laboratorios analíticos.

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. 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.



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES

Universidad Nacional de La Pampa

CORRESPONDE AL ANEXO II DE LA RESOLUCIÓN Nº 302/22

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

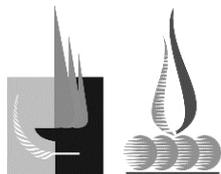
Control de calidad. Control interlaboratorio. Definición de puntos críticos de control. Medidas preventivas y correctoras. Gráficos de control estándar de medias y amplitudes (Shewart). Límites de control. Cartas para el laboratorio analítico. Diseño y evaluación de ensayos colaborativos. Cartas de sumas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



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES

Universidad Nacional de La Pampa

CORRESPONDE A LA RESOLUCIÓN N° 302/22

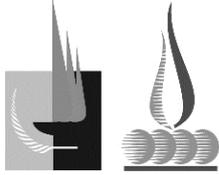
ANEXO III

ASIGNATURA: QUIMIOMETRÍA

CICLO LECTIVO: A partir de 2023.

BIBLIOGRAFÍA

1. BONAMENTE, M. "Statistical an Analysis of Scientific Data". 2nd Edition. Springer. New York. 2017.
2. BRERETON, R. G. "Applied Chemometrics for Scientist". John Wiley & Sons. Chischester. England. 2007.
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. HASTIE, T., TIBSHIRANI, R., FRIEDMAN, J. "The Elements of Statistical of Statistical Learning". 2nd Edition. Springer. New York, 2017.
6. HEUMANN, C., SCHOMAKER SHALABH, M. "Introduction to Statistics and Data Analysis". Springer. Germany. 2016.
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. 1997.
8. MEIER, P., ZÜND, R. E. "Statistical Methods in Analytical Chemistry". 2nd edition. Ed. Wiley & Sons. Toronto. Canada. 2000.
9. MILLER, J.C. Y MILLER, J.N. "Estadística y Quimiometría para Química Analítica", 4ª ed. Pearson Educación S.A. Madrid. España. 2002.
10. MONGAY FERNANDEZ, C. "Quimiometría". Publicaciones Universidad de Valencia. Valencia. España. 2005.
11. PRICHARD, E., BARWICK, V. "Quality Assurance in Analytical Chemistry". Ed. Wiley & Sons. Chichester. England. 2007.
12. RAMIS RAMOS, G. Y GARCÍA ALVAREZ-COQUE, M.C. "Quimiometría". Editorial Síntesis S. A. Madrid. España. 2001.
13. VALCÁRCEL CASES, M., LÓPEZ-LORENTE, A.I., LÓPEZ-JIMÉNEZ, M.A. "Foundations of Analytical Chemistry. A Teaching-Learning Approach". Springer. Switzerland. 2018.



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES

Universidad Nacional de La Pampa

CORRESPONDE A LA RESOLUCIÓN N° 302/22

ANEXO IV

ASIGNATURA: QUIMIOMETRÍA

CICLO LECTIVO: A partir de 2023.

PROGRAMA DE TRABAJOS PRÁCTICOS

Trabajo Práctico N° 1: Errores en el análisis cuantitativo. Errores absolutos y relativos. Media y desvío estándar. Propagación de errores en el laboratorio.

Trabajo Práctico N° 2: Tratamiento de datos analíticos. Distribución de frecuencias. Histogramas. Gráficos tallo hoja. Gráficos box plot.

Trabajo Práctico N° 3: Distribución normal y límites de confianza. Cálculo de probabilidades. Determinación de intervalo de confianza y límites de confianza.

Trabajo Práctico N° 4: Pruebas de significación. Prueba de Grubbs y Dixon. Prueba t de una y dos colas. Prueba F de una y dos colas. Prueba X cuadrado.

Trabajo Práctico N° 5: Cartas de control. Determinación de los límites de advertencia y control, superior e inferior. Análisis de casos dentro y fuera de control estadístico.

Trabajo Práctico N° 6: Análisis de la varianza (ANOVA de un factor). Evaluación de condiciones para el uso de ANOVA. Comparación de más de dos medias muestrales a través de ANOVA.

Trabajo Práctico N° 7: Regresión lineal, calibración analítica y ANOVA. Regresión lineal univariada. Coeficiente de regresión lineal. Pruebas de bondad de ajuste. Aplicaciones para calibración en Química Analítica.



CORRESPONDE A LA RESOLUCIÓN N° 302/22

ANEXO V

ASIGNATURA: QUIMIOMETRÍA

CICLO LECTIVO: A partir de 2023.

ACTIVIDADES ESPECIALES QUE SE PREVÉN

No se prevén actividades especiales.



CORRESPONDE A LA RESOLUCIÓN N° 302/22

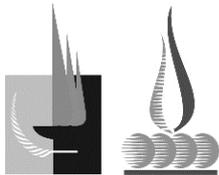
ANEXO VI

ASIGNATURA: QUIMIOMETRÍA

CICLO LECTIVO: A partir de 2023.

PROGRAMA DE EXAMEN

Se evaluará según programa analítico.



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES

Universidad Nacional de La Pampa

CORRESPONDE A LA RESOLUCIÓN N° 302/22

ANEXO VII

ASIGNATURA: QUIMIOMETRÍA

CICLO LECTIVO: A partir de 2023.

METODOLOGÍA DE EVALUACIÓN Y/U OTROS REQUERIMIENTOS

La evaluación del aprendizaje se realizará según varias dimensiones. El objeto de la evaluación se centrará en valorar las competencias desarrolladas por el/la estudiante como resultado de su aprendizaje. Será llevada a cabo en forma continua y formativa, donde la calificación final contemplará los diferentes momentos y las diferentes fuentes. Se propiciarán las condiciones que permitan la participación del alumnado en el proceso de su propia evaluación.

Los Trabajos Prácticos, cualquiera sea su naturaleza, se evaluarán mediante exámenes parciales los cuales podrán integrar diversos conceptos valorando toda aptitud que se considere pertinente a la instancia. Las fechas de los exámenes parciales y sus correspondientes recuperatorios, según el reglamento vigente, se fijarán durante el transcurso de la primera semana de cursada y una vez sustanciados los mismos serán calificados como "Aprobado" o "Desaprobado". Las condiciones de aprobación se informarán a las y los estudiantes durante el desarrollo de la primera semana de cursada. Así mismo, dada la condición de evaluación continua se podrán examinar producciones monográficas, infográficas, videos y toda otra forma evaluativa prevista según la reglamentación vigente.

La evaluación del estudiantado implica de forma no excluyente la formación académica, sin embargo, esta no agota la formación profesional. Por lo tanto, se atenderá particularmente a aquellas iniciativas y producciones que surjan del orden volitivo de cada estudiante en particular y/o grupos de estudiantes fomentando el desarrollo de actividades extracurriculares que puedan surgir de estas instancias.

El examen final podrá consistir en la presentación oral y/o escrita de un tema elaborado por el/la estudiante, donde se integren diferentes temáticas tratadas a lo largo de la asignatura y/o en el desarrollo de un temario propuesto por la mesa examinadora, de las características que ésta considere apropiadas según la reglamentación vigente. La aprobación por promoción o en condición de libre será prevista por los responsables de la cátedra según la reglamentación vigente y de existir será informada junto a sus condiciones durante el desarrollo de la primera semana de cursado.

Todo otro requerimiento, según reglamentación vigente, será informado por los responsables de la cátedra durante el desarrollo de la primera semana de cursado.

Las diferentes instancias de evaluación se registrarán por la normativa vigente de la FCEyN-UNLPam.