



## RESOLUCIÓN N° 458

SANTA ROSA, 20 de noviembre de 2020.-

### VISTO:

El Expte. N° 490/20, iniciado por el Dr. José CAMIÑA, s/eleva programa de la asignatura “QUIMIOMETRÍA” - Licenciatura en Química (Plan 2012); y

### CONSIDERANDO:

Que el 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 2020.

Que el mismo cuenta con el aval de la Dra. Marianela SAVIO, docente del espacio curricular afín.

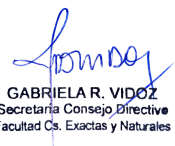
Que en la sesión ordinaria del día 19 de noviembre de 2020, el Consejo Directivo, aprobó por unanimidad, el despacho presentado por la Comisión de Enseñanza.

### POR ELLO:

### EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES RESUELVE:

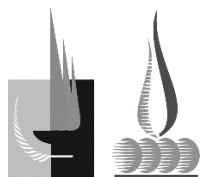
**ARTÍCULO 1º:** Aprobar el Programa de la asignatura “QUIMIOMETRÍA” correspondiente a la carrera Licenciatura en Química (Plan 2012), a partir del ciclo lectivo 2020, que como Anexos I, II, III, IV, V, VI y VII forma parte de la presente Resolución.

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

  
Firmado digitalmente por  
Gabriela R Vidoz  
Fecha:  
2020.11.19  
19:59:14 -03'00'

GABRIELA R. VIDÓZ  
Secretaría Consejo Directivo  
Facultad Cs. Exactas y Naturales

Mg. María Eva ASCHERI  
PRESIDENTE CONSEJO DIRECTIVO  
Fac. Cs. Exactas y Naturales  
Universidad Nacional de La Pampa



FACULTAD DE CIENCIAS  
EXACTAS Y NATURALES

Universidad Nacional de La Pampa

CORRESPONDE AL ANEXO I DE LA RESOLUCIÓN N° 458/2020

## **ANEXO I**

**DEPARTAMENTO DE: QUÍMICA**

**ACTIVIDAD CURRICULAR: QUIMIOMETRÍA**

**CARRERA - PLAN: LICENCIATURA EN QUÍMICA – PLAN 2012**

**CURSO: TERCER AÑO**

**RÉGIMEN: CUATRIMESTRAL – DESARROLLO: 18/08 al 24/11**

**CARGA HORARIA SEMANAL: Teórico-Práctico: 6 HORAS SEMANALES**

**CARGA HORARIA TOTAL: 90 HORAS**

**CICLO LECTIVO: 2020 en adelante**

### **EQUIPO DOCENTE:**

- Dr. José Manuel CAMIÑA: Profesor Adjunto Regular Dedicación Exclusiva a/c.
- Dr. Miguel Ángel CANTARELLI: Jefe de Trabajos Prácticos Interino Dedicación Exclusiva.



CORRESPONDE AL ANEXO I DE LA RESOLUCIÓN N° 458/2020

### FUNDAMENTACION:

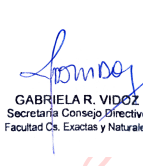
En el análisis de datos químicos, es fundamental el conocimiento, aplicación e interpretación de herramientas estadísticas a los fines de informes y/o validación de resultados. Así mismo, la participación del licenciado en química en cada una de las etapas del análisis, incluyendo el muestreo, resulta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

Por ello, la asignatura Quimiometría tiene la intención capacitar y formar al 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.
- Conformar equipos multidisciplinarios para el diseño y análisis estadístico de problemas ambientales.
- Intervenir en forma directa en el diseño de experiencias 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.

Firmado digitalmente por Gabriela R Vidoz  
Fecha: 2020.11.19 19:59:42 -03'00'



GABRIELA R. VIDOZ  
Secretaría Consejo Directivo  
Facultad Cs. Exactas y Naturales

Mg. María Eva ASCHERI  
PRESIDENTE CONSEJO DIRECTIVO  
Fac. Cs. Exactas y Naturales  
Universidad Nacional de La Pampa



CORRESPONDE AL ANEXO II DE LA RESOLUCIÓN N° 458/2020

## **ANEXO II**

**ASIGNATURA:** QUIMIOMETRÍA

**CICLO LECTIVO:** 2020 en adelante

### **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.



CORRESPONDE AL ANEXO II DE LA RESOLUCIÓN N° 458/2020

### **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  $\chi^2$ . 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.

### **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).



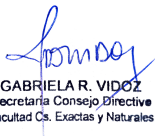
CORRESPONDE AL ANEXO II DE LA RESOLUCIÓN N° 458/2020

### **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.

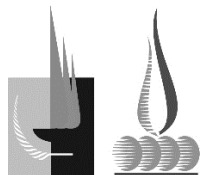
### **UNIDAD 10**

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 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.

  
GABRIELA R. VIDOZ  
Secretaría Consejo Directivo  
Facultad Cs. Exactas y Naturales

Firmado digitalmente por Gabriela R Vidoz  
Fecha: 2020.11.19 20:00:11 -03'00'

Mg. María Eva ASCHERI  
PRESIDENTE CONSEJO DIRECTIVO  
Fac. Cs. Exactas y Naturales  
Universidad Nacional de La Pampa



FACULTAD DE CIENCIAS  
EXACTAS Y NATURALES

Universidad Nacional de La Pampa

CORRESPONDE AL ANEXO III DE LA RESOLUCIÓN N° 458/2020


### ANEXO III

**ASIGNATURA:** QUIMIOMETRÍA

**CICLO LECTIVO:** 2020 en adelante

### BIBLIOGRAFÍA

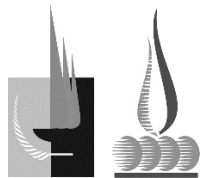
1. Ramis Ramos, G. y García Alvarez-Coque, M.C. "Quimiometría". Editorial Síntesis S. A. Madrid. España. 2001.
2. Miller, J.C. y Miller, J.N. "Estadística y Quimiometría para Química Analítica", 4ª ed. Pearson Educación S.A. Madrid. España. 2002.
3. Valcárcel Cases, M., López-Lorente, A.I., López-Jiménez, M.A. "Foundations of Analytical Chemistry. A Teaching-Learning Approach". Springer. Switzerland. 2018.
4. Bonamente, M. "Statistical an Analysis of Scientific Data". 2<sup>nd</sup> Edition. Springer. New York. 2017.
5. Cámara, C. (ed.), Fernandez, P., Martín-Esteban, A. y Pérez-Conde, C. "Toma y tratamiento de muestras". Editorial Síntesis. Madrid. España. 2004.
6. Heumann, C., Schomaker Shalabh, M. "Introduction to Statistics and Data Analysis". Springer. Germany. 2016.
7. Danzer, K. "Analytical Chemistry. Theoretical and Metrological Fundamentals". Springer-Verlag. Berlin. Germany. 2007.
8. Brereton, R. G. "Applied Chemometrics for Scientist". John Wiley & Sons. Chischester. England. 2007.
9. Mongay Fernandez, C. "Quimiometría". Publicaciones Universidad de Valencia. Valencia. España. 2005.
10. Hastie, T., Tibshirani, R., Friedman, J. "The Elements of Statistical of Statistical Learning". 2<sup>nd</sup> Edition. Springer. New York, 2017.
11. 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.
12. Meier, P., Zünd, R. E. "Statistical Methods in Analytical Chemistry". 2<sup>nd</sup> edition. Ed. Wiley & Sons. Toronto. Canada. 2000.
13. Prichard, E., Barwick, V. "Quality Assurance in Analytical Chemistry". Ed. Wiley & Sons. Chichester. England. 2007.

  
GABRIELA R. VIDOZ  
Secretaría Consejo Directivo  
Facultad Cs. Exactas y Naturales

Firmado  
digitalmente por  
Gabriela R Vidoz

Fecha:  
2020.11.19  
20:00:42 -03'00'

Mg. María Eva ASCHERI  
PRESIDENTE CONSEJO DIRECTIVO  
Fac. Cs. Exactas y Naturales  
Universidad Nacional de La Pampa



FACULTAD DE CIENCIAS  
EXACTAS Y NATURALES

Universidad Nacional de La Pampa

CORRESPONDE AL ANEXO IV DE LA RESOLUCIÓN N°458/2020

## ANEXO IV

**ASIGNATURA:** QUIMIOMETRÍA

**CICLO LECTIVO:** 2020 en adelante

### PROGRAMA DE TRABAJOS PRÁCTICOS

Trabajo Práctico N° 1: Errores en el análisis cuantitativo.

Trabajo Práctico N° 2: Tratamiento de datos analíticos.

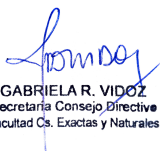
Trabajo Práctico N° 3: Distribución normal y límites de confianza.

Trabajo Práctico N° 4: Pruebas de hipótesis.

Trabajo Práctico N° 5: Cartas de control

Trabajo Práctico N° 6: Análisis de la varianza (ANOVA de un factor).

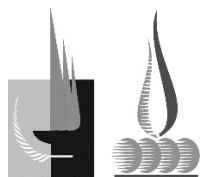
Trabajo Práctico N° 7: Regresión lineal, calibración analítica y ANOVA.

  
Firmado  
digitalmente por  
Gabriela R Vidóz  
Fecha:  
2020.11.19  
20:01:04 -03'00'

GABRIELA R. VIDOZ  
Secretaría Consejo Directivo  
Facultad Cs. Exactas y Naturales

Mj. María Eva ASCHERI  
PRESIDENTE CONSEJO DIRECTIVO  
Fac. Cs. Exactas y Naturales  
Universidad Nacional de La Pampa





FACULTAD DE CIENCIAS  
EXACTAS Y NATURALES

Universidad Nacional de La Pampa

CORRESPONDE AL ANEXO V DE LA RESOLUCIÓN N° 458/2020

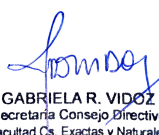
## ANEXO V

**ASIGNATURA:** QUIMIOMETRÍA

**CICLO LECTIVO:** 2020 en adelante

**ACTIVIDADES ESPECIALES QUE SE PREVÉN**

No se prevén actividades especiales.

  
GABRIELA R. VIDÓZ  
Secretaría Consejo Directivo  
Facultad Cs. Exactas y Naturales

Firmado  
digitalmente por  
Gabriela R Vidoz  
Fecha:  
2020.11.19  
20:01:25 -03'00'

Mg. María Eva ASCHERI  
PRESIDENTE CONSEJO DIRECTIVO  
Fac. Cs. Exactas y Naturales  
Universidad Nacional de La Pampa



CORRESPONDE AL ANEXO VI DE LA RESOLUCIÓN N° 458/2020

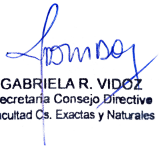
## ANEXO VI

**ASIGNATURA:** QUIMIOMETRÍA

**CICLO LECTIVO:** 2020 en adelante

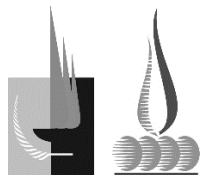
## PROGRAMA DE EXAMEN

Corresponde al programa analítico.

  
GABRIELA R. VIDOZ  
Secretaría Consejo Directivo  
Facultad Cs. Exactas y Naturales

Firmado digitalmente por  
Gabriela R Vidoz  
Fecha:  
2020.11.19  
20:01:46 -03'00'

Mg. María Eva ASCHERI  
PRESIDENTE CONSEJO DIRECTIVO  
Fac. Cs. Exactas y Naturales  
Universidad Nacional de La Pampa



FACULTAD DE CIENCIAS  
EXACTAS Y NATURALES

Universidad Nacional de La Pampa

CORRESPONDE AL ANEXO VII DE LA RESOLUCIÓN N° 458/2020

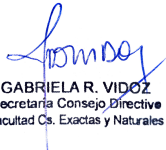
## ANEXO VII

**ASIGNATURA:** QUIMIOMETRÍA

**CICLO LECTIVO:** 2020 en adelante

**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.



GABRIELA R. VIDOZ  
Secretaría Consejo Directivo  
Facultad Cs. Exactas y Naturales

Firmado  
digitalmente por  
Gabriela R Vidoz  
Fecha:  
2020.11.19  
20:02:15 -03'00'

Mg. María Eva ASCHERI  
PRESIDENTE CONSEJO DIRECTIVO  
Fác. Cs. Exactas y Naturales  
Universidad Nacional de La Pampa