



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES

Uruguay 151 - (6300) Santa Rosa La Pampa
Tel.: (02954) 425166 - 422026 - Fax: 432535
Pagina Web: <http://www.exactas.unlpam.edu.ar>



RESOLUCION N° 457

SANTA ROSA, 20 de diciembre de 2013

VISTO:

El Expte. N° 1141/13, iniciado por la Vicedirectora del Departamento de Química, S/eleva programa de la asignatura "QUIMIOMETRÍA" (Licenciatura en Química); y

CONSIDERANDO:

Que el Dr. José 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 año 2013.

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 extraordinaria del día 19 de diciembre de 2013 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, a partir del ciclo lectivo 2013, que como Anexos I, II, III, IV, V y VI forma parte de la presente Resolución.

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

MARÍA LUISA GONZALEZ
SECRETARÍA CONSEJO DIRECTIVO
Facultad Cs. Exactas y Naturales

Dra. Graciela Beatriz ROSTON
Presidente Consejo
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES

Uruguay 151 - (6300) Santa Rosa - La Pampa

Tel.: 02954-425166 / 422026 - Fax.: 432535

Email: fexactas@unlpam.edu.ar

Página Web: <http://www.exactas.unlpam.edu.ar>



UNIVERSIDAD NACIONAL
de LA PAMPA

Corresponde a la Resolución N° 457/13 CD

ANEXO I

DEPARTAMENTO DE: QUÍMICA

ASIGNATURA: QUIMIOMETRÍA

CARRERA - PLAN: LICENCIATURA EN QUÍMICA – PLAN 2012.

CURSO: TERCERO

RÉGIMEN: APROBACIÓN DE CURSADA Y EXÁMEN FINAL

CARGA HORARIA:

- Teóricos:
- Prácticos:
- Teórico-Práctico: 6 HORAS SEMANALES

CICLO LECTIVO: 2013

EQUIPO DOCENTE DE LA CÁTEDRA:

Profesor Adjunto dedicación exclusiva a/c: **Dr. José Manuel CAMIÑA**

Jefe de Trabajos Prácticos dedicación exclusiva: **Dr. Miguel Ángel CANTARELLI**

Colaboradores:

Dra. Marianela SAVIO

Lic. Silvana Mariela AZCARATE.



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES
Uruguay 151 - (6300) Santa Rosa - La Pampa
Tel.: 02954-425166 / 422026 - Fax.: 432535
Email: fxactas@unlpam.edu.ar
Página Web: <http://www.exactas.unlpam.edu.ar>

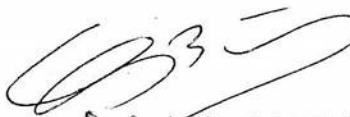


Corresponde al ANEXO I de la Resolución N° 457/13 CD

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.


MARÍA INÉS GREGORIO
PRESIDENTE DEL CONSEJO DIRECTIVO
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales


Dr. Graciela Beatriz ROSTON
Presidente Consejo Directivo
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES
Uruguay 151 - (6300) Santa Rosa - La Pampa
Tel.: 02954-425166 / 422026 - Fax.: 432535
Email: fexactas@unlpam.edu.ar
Página Web: <http://www.exactas.unlpam.edu.ar>



Corresponde a la Resolución N° 457/13 CD

ANEXO II

ASIGNATURA: QUIMIOMETRÍA

CICLO LECTIVO: 2013

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.



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES
Uruguay 151 - (6300) Santa Rosa - La Pampa
Tel.: 02954-425166 / 422026 - Fax.: 432535
Email: feexactas@unlpam.edu.ar
Página Web: <http://www.exactas.unlpam.edu.ar>



Corresponde al ANEXO II de la Resolución N° 457/13 CD

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.

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




FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES
Uruguay 151 - (6300) Santa Rosa - La Pampa
Tel.: 02954-425166 / 422026 - Fax.: 432535
Email: fexactas@unlpam.edu.ar
Página Web: <http://www.exactas.unlpam.edu.ar>




UNIVERSIDAD NACIONAL
de LA PAMPA

Corresponde al ANEXO II de la Resolución N° 457/13 CD

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.


MARÍA INÉS GREGORIO
SECRETARIA CONSEJO DIRECTIVO
Facultad Cs. Exactas y Naturales


Dra. Graciela Beatriz ROSTÓN
Presidente Consejo Directivo
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES
Uruguay 151 - (6300) Santa Rosa - La Pampa
Tel.: 02954-425166 / 422026 - Fax.: 432535
Email: fexactas@unlpam.edu.ar
Página Web: <http://www.exactas.unlpam.edu.ar>



Corresponde a la Resolución N° 457/13 CD

ANEXO III

ASIGNATURA: QUIMIOMETRÍA

CICLO LECTIVO: 2013

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.



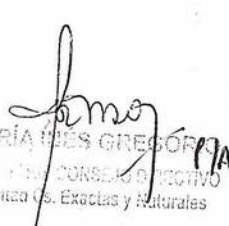
FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES
Uruguay 151 - (6300) Santa Rosa - La Pampa
Tel.: 02954-425166 / 422026 - Fax.: 432535
Email: fexactas@unlpam.edu.ar
Página Web: <http://www.exactas.unlpam.edu.ar>




UNLPam
de ser NACIONAL
UNIVERSIDAD NACIONAL
de LA PAMPA

Corresponde al ANEXO III de la Resolución N° 457/13 CD

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". 1^a. Ed. Reverté S.A. Barcelona. España. 1992.
15. Skoog, D., West, D., y Holler J. "Química Analítica". 6^a. Ed. Mc. Graw-Hill. México. 1995.
16. Harris, D.C. "Análisis Químico Cuantitativo". 3^a Ed. Grupo Editorial Iberoamérica. México. 1992.


MARÍA INÉS GREGORIO
SECRETARÍA DEL CONSEJO DIRECTIVO
Facultad Cs. Exactas y Naturales


Dra. Graciela Beatriz ROSTON
Presidente Consejo Directivo
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES
Uruguay 151 - (6300) Santa Rosa - La Pampa
Tel.: 02954-425166 / 422026 - Fax.: 432535
Email: fexactas@unlpam.edu.ar
Página Web: <http://www.exactas.unlpam.edu.ar>



UNIVERSIDAD NACIONAL
de LA PAMPA

Corresponde a la Resolución N° 457/13 CD

ANEXO IV

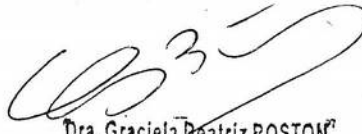
ASIGNATURA: QUIMIOMETRÍA

CICLO LECTIVO: 2013

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 significación.
- Trabajo Práctico N° 5: Cartas de control.
- Trabajo Práctico N° 6: Análisis de la varianza (ANOVA) de un factor.
- Trabajo Práctico N° 7: Errores en el Análisis Instrumental. Regresión y correlación.

MARÍA DEL CARMEN
SECRETARÍA DE CONSEJO DIRECTIVO
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales


Dra. Graciela Beatriz ROSTON
Presidente Consejo Directivo
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES
Uruguay 151 - (6300) Santa Rosa - La Pampa
Tel.: 02954-425166 / 422026 - Fax.: 432535
Email: fexactas@unlpam.edu.ar
Página Web: <http://www.exactas.unlpam.edu.ar>



Corresponde a la Resolución N° 457/13 CD

ANEXO V

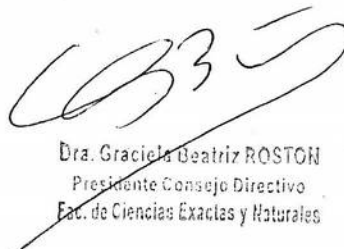
ASIGNATURA: QUIMIOMETRÍA

CICLO LECTIVO: 2013

ACTIVIDADES ESPECIALES QUE SE PREVÉN

No se prevén actividades especiales.

MARÍA M. GREGORIA
SECRETARÍA EJECUTIVA
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales


Dra. Graciela Beatriz ROSTON
Presidente Consejo Directivo
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES
Uruguay 151 - (6300) Santa Rosa - La Pampa
Tel.: 02954-425166 / 422026 - Fax.: 432535
Email: fexactas@unlpam.edu.ar
Página Web: <http://www.exactas.unlpam.edu.ar>



UNIVERSIDAD NACIONAL
de LA PAMPA

Corresponde a la Resolución N° 457/13 CD

ANEXO VI

ASIGNATURA: QUIMIOMETRÍA

CICLO LECTIVO: 2013

PROGRAMA DE EXAMEN

BOLILLA 1

Introducción al Tratamiento de los datos analíticos. Precisión y exactitud. Error absoluto y error relativo. Error sistemático. Errores aleatorios. Propagación de errores aleatorios y sistemáticos. Cifras significativas. Repetitividad y reproducibilidad.

BOLILLA 2

Población y muestra. Tablas de frecuencias. Representaciones gráficas. Histogramas y distribuciones. Box-plot.

BOLILLA 3

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.

BOLILLA 4

Medidas de tendencia central y de dispersión. Criterio de rechazo de valores dudosos en función del número de observaciones. Test Q de Dixon. Test de Grubs.

BOLILLA 5

Concepto de probabilidad. Distribuciones de probabilidad para variables discretas y continuas. 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. Intervalos de confianza para el promedio. Límites de confianza. Función z. Tablas de probabilidades. Nivel de significancia. Error de tipo I. Error de tipo II.



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES

Uruguay 151 - (6300) Santa Rosa - La Pampa

Tel.: 02954-425166 / 422026 - Fax.: 432535

Email: fexactas@unlpam.edu.ar

Página Web: <http://www.exactas.unlpam.edu.ar>



Corresponde al ANEXO VI de la Resolución N° 457/13 CD

BOLILLA 6

Tratamiento estadístico de datos analíticos. Pruebas de hipótesis. Criterios de aceptación o rechazo de hipótesis. Evaluación del sesgo de un procedimiento usando test t. Comparación de varianzas. Prueba F. Usos de los intervalos de confianza. Presentación de resultados de una prueba de hipótesis. Pruebas de uno y dos lados.

BOLILLA 7

Muestreo estadístico. 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.

BOLILLA 8

Control de calidad. Control interlaboratorio. Puntos críticos de control, diseño experimental para su determinación. Gráficos de control estándar de medias y amplitudes (Shewart), de sumas acumulativas (cusum). Límites de control. Cartas para el laboratorio analítico. Diseño y evaluación de ensayos colaborativos.

BOLILLA 9

Análisis de la varianza (ANOVA). Terminología y ejemplos. Condiciones para la utilización de ANOVA. Estimación de las varianzas y sus significados. ANOVA de una vía de efecto fijo y efecto aleatorio. Descomposición de la varianza total en sus componentes. Varianza de comparación. Tabla de ANOVA. Test de Bartlett y Levene para comparación de más de dos varianzas.

BOLILLA 10

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. Predicción de la concentración desconocida mediante interpolación inversa y estimación del intervalo de confianza. Comparación de dos procedimientos por regresión lineal. Cifras de mérito: sensibilidad, límite de detección (LOD), límite de cuantificación (LOQ).

MARIA INES MEGLIORINI
PRESIDENTE CONEJO
FAC. DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Dra. Graciela Beatriz ROSTON
Presidente Consejo
Fac. de Ciencias Exactas y Naturales