FACULTAD: CIENCIAS BASICAS

PROGRAMA: QUIMICA

DEPARTAMENTO DE: QUIMICA

CURSO:	QUIMIOMETRIA	**CÓDIGO:**	156304
ÁREA:	QUIMICA ANALITICA		
REQUISITOS:	156262, 156250, 156325	**CORREQUISITO:**	
CRÉDITOS:	2	**TIPO DE CURSO**:	TEORICO-PRACTICO
FECHA ÚLTIMA ACTUALIZACIÓN	Febrero 2025		

JUSTIFICACIÓN

La quimiometría es la ciencia de extraer información de sistemas químicos mediante el tratamiento de los datos que proporcionan. Estos tratamientos utilizan técnicas matemáticas y estadísticas, tanto para el diseño de los experimentos que darán lugar a los datos, como para su proceso con el objetivo de obtener información. Una de las áreas donde la quimiometría tiene especial aplicación es la Química Analítica, dada la cantidad de datos que se generan. Por lo tanto, el químico contemporáneo se ve enfrentado a analizar esta información con el objetivo de generar conocimiento mediante la búsqueda de tendencias y patrones en dicha información. Además, se deben generar estrategias que le permitan desarrollar experimentos más eficientes, ahorrando materiales e insumos, y optimizando los recursos para lograr el objetivo de los experimentos. Para ello, se realizan modelos de calibración multivariable y multivariante (MLR, PCR, PLSR, entre otros) partiendo de propiedades medibles por técnicas estándar seguidas por normas internacionales y se igualan a variables numéricas extraídas de mediciones instrumentales, como Espectroscopía Infrarroja (FT-IR), Espectroscopía RAMAN, Resonancia Magnética Nuclear (RMN), Espectrometría de masas (MS), etc. De esta manera encontrar correlaciones entre las propiedades fisicoquímicas y las variables independientes.

OBJETIVO GENERAL

Proporcionar al estudiante diferentes herramientas matemáticas y estadísticas, necesarias para examinar información química, extraer información útil de los datos y para diseñar experimentos químicos.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Utilizar herramientas estadísticas básicas para tomar decisiones comparativas.
- Caracterizar y visualizar datos utilizando estadística descriptiva.
- Construir modelos matemáticos predictivos para predecir una respuesta basada en una o más variables dependientes.
- Mejorar la calidad de las señales analíticas.
- Encontrar patrones en los datos.
- Incentivar al estudiante para que haga uso de la estadística en sus labores diarias de tal manera que ella ayude a formar pensamiento crítico en él.
- Comprender la importancia de los experimentos bien planificados y la importancia de recopilar buenos datos.

COMPETENCIAS

Interpretativas:

- Capacidad para interpretar los resultados obtenidos aplicando técnicas estadísticas, diseño de experimentos y métodos de optimización de procesos a los datos experimentales obtenidos en un laboratorio de química analítica.
- Habilidad para comprender grafos, gráficas, tablas, matrices y ecuaciones matemáticas.

Argumentativas:

- Justificación de la necesidad del rigor matemático para enunciar argumentos robustos.
- Habilidad para relacionar conceptos matemáticos con conceptos químicos y químicos con matemáticos.
- Integrar conocimientos y afrontar la complejidad de formular juicios a partir de información que, al ser incompleta o limitada, incluye reflexiones sobre responsabilidades sociales y éticas relacionadas con la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- Comunicar las conclusiones, y las razones que las sustentan, a públicos especializados y no especializados de forma clara e inequívoca.

Propositivas:

- Habilidad para detectar situaciones químicas aún no estudiadas, así como conceptos químicos que sean susceptibles de ser matematizados.
- Resolución de problemas químicos mediante la aplicación de conceptos estadísticos.
- Tener y comprender conocimientos que brinden la base u oportunidad para ser innovador en el desarrollo y / o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- Capacidad para evaluar el impacto del uso de la química en el desarrollo sostenible de la sociedad.
- Aplicar sus conocimientos y su capacidad para resolver problemas en entornos nuevos o desconocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su campo de estudio.

UNIDAD 1. EVOLUCIÓN HISTÓRICA DE LA QUIMIOMETRÍA Y SUS APLICACIONES EN QUÍMICA ANALÍTICA

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Introducción.	2	1
Los problemas analíticos.	2	1
Errores en el análisis cuantitativo.	2	1
¿Qué son los modelos matemáticos?	2	1
Aplicaciones de los modelos matemáticos.	2	1

UNIDAD 2. PROCESAMIENTO DE DATOS EN LOS LABORATORIOS DE ANÁLISIS

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Comparación y transferencia de métodos.	2	1
Precisión intermedia.	2	1
Linealidad.	2	1
Gráficos de control y análisis de tendencias.	2	1
Análisis de datos de origen sensorial.	2	1
I PARCIAL	4	

UNIDAD 3. ESTADISTICA BASICA

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Estadística descriptiva	2	2
Pruebas estadísticas	4	3
Análisis de varianza (ANOVA)	4	3

UNIDAD 4. DISEÑO Y OPTIMIZACIÓN DE MÉTODOS

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Diseños experimentales.	3	2
Métodos de optimización secuencial.	2	1
Ajuste de superficies de respuesta.	3	2
II PARCIAL	2	

UNIDAD 5. ANALISIS MULTIVARIADO

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Análisis de conglomerados	4	3
Análisis de componentes principales (PCA)	6	3
Regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS)	6	3
III PARCIAL	4	

TOTAL	64	32

METODOLOGÍA (Debe evidenciarse el empleo de nuevas tecnologías de apoyo a la enseñanza y al aprendizaje)

- **Sesiones de exposición de conceptos:** Exposición de contenidos mediante presentación o explicación por parte del profesor.
- **Sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos:** Resolución de ejercicios, planteamiento / resolución de problemas y presentación / discusión de casos por un profesor con la participación activa de los alumnos.
- **Seminarios:** Exposición realizada por un docente con el fin de revisar, discutir y responder preguntas sobre materiales y temas presentados en las sesiones de exposición de conceptos y sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos.
- **Trabajo práctico / laboratorio:** Realización de actividades de laboratorio o similares (prácticas con computadora, proyectos, talleres, etc.) por parte del alumno, bajo la supervisión directa de un profesor.
- **Presentaciones:** Presentación oral por parte de los estudiantes. Puede ser un trabajo elaborado por el alumno mediante la búsqueda de la literatura publicada o un resumen de una práctica o proyecto realizado por el alumno.
- **Actividades de estudio personal por parte de los estudiantes:** Trabajo personal requerido del estudiante para adquirir las competencias de cada asignatura y asimilar los conocimientos presentados en las sesiones de exposición de conceptos y de resolución de ejercicios, problemas y casos, utilizando, cuando sea necesario, la consulta recomendada. material.
- **Actividades de evaluación:** Declaraciones orales y / o escritas realizadas durante un semestre o después del mismo.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

La metodología desarrollada pretender calificar los resultados de aprendizaje del estudiante frente al conocimiento crítico y el análisis de la información recibida en la diferentes temas. Los resultados de aprendizaje establecidos por el Programa de Química son:

RAP1. Desarrollar procesos de comunicación efectiva y asertiva de resultados mediante informes orales, escritos y/o electrónicos respetando los derechos de autor.

Este se evalúa mediante la presentación de informes de prácticas, exposiciones de o un tema específico y ensayos.

RAP2. Presentar informes técnico-científicos de laboratorio demostrando el cumplimiento de la normatividad ambiental, los estándares de calidad en los procedimientos y las medidas asociadas a ellos, riesgos profesionales, éticos y trabajo en grupo.

Este se evalúa mediante el desempeño durante la realización de las prácticas, presentación de preinformes y diagramas de flujo previos, los informes escritos de los mismos y presentación de los proyectos de aula.

RAP3. Desarrollar metodologías de transferencia de conceptos y/o datos para la solución de problemas en el área de las ciencias naturales.

Se evaluará mediante el manejo e implementación de software especializados, procesamiento y análisis datos.

En cada corte el estudiante deberá entregar un trabajo escrito o presentación de artículo científico que será depositado en la página en internet del curso. Cada uno equivaldrá al 15% de la nota final del primer y segundo corte, y al 10% del tercer corte. Al final de cada corte el estudiante presentará una evaluación escrita, cada una equivaldrá al 20% de la nota final de cada corte.

BIBLIOGRAFÍA DISPONIBLE EN UNIDAD DE RECURSOS BIBLIOGRÁFICOS DE LA UNIVERSIDAD DE PAMPLONA

Otto, M. *Chemometrics: Statistics and computer application in analytical chemistry*, Wiley-VCH: Weinheim, 2007.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- Miller, J. N., & Miller, J. C. (2002). *Estadística y quimiometría para química analítica*. 4/E.
- Mullins, E. (2003). *Statistics for the quality control chemistry laboratory*. Royal Society of Chemistry.
- Vandeginste, B. G. M., Deming, S. N., Michotte, & Kaufman, L. (1988). *Chemometrics: a textbook*.
- Brereton. R. G. (2003) *Chemometrics. Data analysis for the laboratory and chemical plant*. Wiley.
- Pomerantsev Alexey L. (2014). *Chemometrics in Excel*. Wiley.

DIRECCIONES ELECTRÓNICAS DE APOYO AL CURSO

- NIST Engineering Statistics Handbook
- Hyperstat Online Statistics Textbook
- Nature's Statistics for Biologists
- Analytical and Bioanalytical Chemistry
- Analytical Chimica Acta
- Analytical Chemistry
- Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems
- Environmental Science and Technology
- Journal of Agricultural and Food Chemistry
- The Analyst
- Talanta
- Trends in Analytical Chemistry

UNIDAD N 1

NOMBRE DE LA UNIDAD: EVOLUCIÓN HISTÓRICA DE LA QUIMIOMETRÍA Y SUS APLICACIONES EN QUÍMICA ANALÍTICA

COMPETENCIAS A DESARROLLAR: Interpretativas, argumentativas y propositivas.

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGIAS DE EVALUACION QUE INCLUYA LA EVALUACION DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
Introducción. Los problemas analíticos. Errores en el análisis cuantitativo. ¿Qué son los modelos matemáticos? Aplicaciones de los modelos matemáticos.	Exposición por parte del docente de la introducción a la quimiometria y sus aplicaciones. Discusión sobre los problemas analíticos y errores que se comenten en el análisis cuantitativo. Explicación de los modelos matemáticos y sus aplicaciones.	10	Leer y discutir los diferentes textos que se depositen en la página de internet del curso. Escribir un ensayo en el que se desarrolle una interpretación de un artículo científico relacionado con los temas expuestos.	5	5	Evaluación escrita de la unidad. Evaluación del ensayo.

UNIDAD N 2

NOMBRE DE LA UNIDAD: PROCESAMIENTO DE DATOS EN LOS LABORATORIOS DE ANÁLISIS

COMPETENCIAS A DESARROLLAR: Interpretativas, argumentativas y propositivas.

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGIAS DE EVALUACION QUE INCLUYA LA EVALUACION DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
Comparación y transferencia de métodos. Precisión intermedia. Linealidad. Gráficos de control y análisis de tendencias. Análisis de datos de origen sensorial. Procesamiento de señales.	Exposición sobre comparación y transferencia de métodos, precisión intermedia y linealidad. Explicación de los gráficos de control y análisis de tendencias. Aplicación de los filtros de suavizado, derivación e integración de señales. Explicación de la manipulación de señales con base en las transformaciones de Fourier y Hadamard; discusión sobre su uso para filtrado, convolución, deconvolución, integración, reducción de datos y corrección de fondo.	14	Leer el material de la página de internet del curso. Realizar los ejercicios propuestos. Escribir una revisión en la que se profundice alguno de los temas desarrollados en clase.	5	7	Evaluación escrita de la unidad. Evaluación del trabajo escrito.

UNIDAD N 3

NOMBRE DE LA UNIDAD: ESTADISTICA BASICA

COMPETENCIAS A DESARROLLAR: Interpretativas, argumentativas y propositivas.

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGIAS DE EVALUACION QUE INCLUYA LA EVALUACION DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
Estadística descriptiva. Pruebas estadísticas. Análisis de varianza (ANOVA)	Exposición de los temas fundamentales de la estadística descriptiva y la inferencia estadística, resaltando importantes distribuciones como la normal, la de Poisson, la t Student, la F y la χ^2. Explicación de las medidas que caracterizan las dispersiones de los datos; discusión de la ley de propagación del error gaussiana. Explicación de las pruebas estadísticas para comparar conjuntos de datos y para estimar el efecto de los factores experimentales tomando como base el análisis de varianza.	10	Leer el material de la página de internet del curso. Realizar los ejercicios propuestos. Escribir una revisión en la que se profundice alguno de los temas desarrollados en clase.	8	5	Evaluación escrita de la unidad. Evaluación del trabajo escrito.

UNIDAD N 4

NOMBRE DE LA UNIDAD: DISEÑO Y OPTIMIZACIÓN DE MÉTODOS

COMPETENCIAS A DESARROLLAR: Interpretativas, argumentativas y propositivas.

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGIAS DE EVALUACION QUE INCLUYA LA EVALUACION DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
Diseños experimentales. Métodos de optimización secuencial. Procesamiento de datos. Ajuste de superficies de respuesta.	Exposición de los métodos sistemáticos de optimización en química. Discusión sobre la selección de los factores más importantes que influyen en un problema químico con base en métodos estadísticos de diseño de experimentos. Discusión sobre el diseño de experimentos para modelar la relación entre los factores y aplicación de métodos de superficie de respuestas para localizar óptimos. Exposición de las metodologías para interpretar datos químicos como cromatrogramas, espectros, registros electroanalíticos, muestras químicas, etc. Discusión sobre los métodos para preprocesar datos y para calcular semejanzas entre los datos.	10	Leer el material de la página de internet del curso. Realizar los ejercicios propuestos. Escribir una revisión en la que se profundice alguno de los temas desarrollados en clase.	5	5	Evaluación escrita de la unidad. Evaluación del trabajo escrito.

UNIDAD N 5

NOMBRE DE LA UNIDAD: ANALISIS MULTIVARIADO

COMPETENCIAS A DESARROLLAR: Interpretativas, argumentativas y propositivas.

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGIAS DE EVALUACION QUE INCLUYA LA EVALUACION DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
Análisis de conglomerados. Análisis de componentes principales (PCA). Regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS).	Exposición del análisis de conglomerados. Explicación del análisis de componentes principales (PCA), su uso y aplicaciones. Discusión sobre Regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS) y sus aplicaciones. .	20	Leer el material de la página de internet del curso. Realizar los ejercicios propuestos. Escribir una revisión en la que se profundice alguno de los temas desarrollados en clase.	9	10	Evaluación escrita de la unidad. Evaluación del trabajo escrito.