

PROGRAMA - AÑO 2024	
Espacio Curricular:	Quimiometría (Q223) – Plan de estudios 2023
Carácter:	Obligatorio Período: 1º Semestre
Carrera/s:	Licenciatura en Ciencias Básicas con Orientación en Química
Profesor Responsable:	José D´ANGELO
Equipo Docente:	Emilia ABRAHAM
Carga Horaria: 48hs. teóricas: 24 hs; prácticas: 24 hs	
Requisitos de Cursado:	Tener aprobada: Probabilidad y Estadística (M105) Tener regularizada: Química Analítica Instrumental (Q211)

1-EXPECTATIVAS DE LOGRO

Realizar la interpretación estadística de datos provenientes de análisis químicos. Adquirir conocimientos sobre estadística multivariada y procesamiento de señales. Desarrollar diseños experimentales para resolución de problemas de índole químico. Validar estadísticamente resultados analíticos. Desarrollar diseños de muestreo estadístico.

2-DESCRIPTORES

Estadística y calibración y univariante. Estadística y calibración multivariantes. Métodos de clasificación y reconocimiento de patrones. Validación de métodos. Muestreo estadístico. Procesamiento de señales. Diseño de experimentos y optimización de métodos analíticos.

3-CONTENIDOS ANALÍTICOS

UNIDAD 1.- INTRODUCCIÓN A LA QUIMIOMETRÍA

- 1.1. Conceptos generales de estadística y del análisis estadístico multivariado (AEM).
- 1.2. Ejemplos de las aplicaciones más importantes en actividades científicas, tecnológicas e industriales.
- 1.3. Presente y futuro del AEM en el desarrollo de nuevas tecnologías.

UNIDAD 2.- CALIBRACIÓN (REGRESIÓN LINEAL VS. REGRESIÓN MÚLTIPLE)

- 2.1. Calibración lineal.
- 2.2. Regresión lineal múltiple (MLR).
- 2.3. Regresión de componentes principales (PCR).
- 2.4. Regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS).

UNIDAD 3. RECONOCIMIENTO DE PATRONES

- 3.1 Reconocimiento de patrones supervisado y no supervisado.
- 3.2 Análisis de componentes principales (PCA).
- 3.3 Mínimos Cuadrados Parciales (PLS).
- 3.4. Ejemplos de aplicación.

UNIDAD 4. PROCESAMIENTO DE SEÑALES

- 4.1. Procesamiento de datos espectroscópicos y cromatográficos. Generalidades.
- 4.2. Corrección de líneas de fondo y de base.
- 4.3. Señal y ruido. Identificación de picos y líneas de base.
- 4.4. Ajuste de curvas. Ajustes lineales y no lineales. Ajuste múltiple de picos.
- 4.5. Matemáticas espectrales. Normalización de curvas. Derivadas.
- 4.6. Procesamiento de señales. Suavizado. Métodos de deconvolución. Autodeconvolución de Fourier.

UNIDAD 5. APLICACIÓN A PROBLEMAS REALES

- 5.1. Espectroscopia de fluorescencia de rayos X (XRF).
 - 5.1.1. Espectroscopia XRF dispersiva en energías (EDS).
 - 5.1.2. Espectroscopia XRF dispersiva en longitudes onda (WDS).
- 5.1. Espectroscopia de infrarrojo con transformada de Fourier (FTIR).
 - 5.1.1. Espectroscopia FTIR por transmisión.
 - 5.1.2. Espectroscopia FTIR por reflectancia total atenuada (ATR).
- 6. Resolución de problemas concretos con aplicaciones en biogeoquímica, paleontología y ciencias ambientales.
- 7. Interpretación de resultados, elaboración de informes técnicos y publicación de datos científicos.

UNIDAD 6. PRESENTE Y FUTURO DEL ANÁLISIS DE GRANDES CANTIDADES DE DATOS

- 6.1. Tecnologías digitales inteligentes (interrelacionadas, conectadas e integradas).
- 6.2. Inteligencia artificial, robótica y sistemas “autónomos”.

6.2.1. Conceptos básicos de inteligencia artificial clásica, algoritmos de aprendizaje automático (“Machine Learning”) y aprendizaje profundo (“Deep Learning”).

6.2.2. Ejemplos de: sistemas de clasificación de datos en tiempo real, sistemas de conducción autónoma de vehículos, sistemas de defensa y armas robóticas.

6.3. Ética de la ciencia y las nuevas tecnologías. Sistemas de reconocimiento de voz e imagen y “bots” conversacionales (“chatbots”).

6.3.1. Protección del medio ambiente y sostenibilidad del uso de los sistemas inteligentes. ¿Existen estrategias para evitar los efectos negativos del inquietante y vertiginoso avance de las tecnologías de Inteligencia artificial?

4-BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA:

1. Valcárcel, M. y Ríos, A. (Editores). "La calidad en los laboratorios analíticos" Reverté, Barcelona, 1992.
2. Montgomery, D. C. "Design and Analysis of experiments" 4ª edición, John Wiley & Sons, New York, 1997.
3. Ramis Ramos, G. y García Álvarez-Coque, Mª C. "Quimiometría" Síntesis, Madrid, 2001
4. Millar, J. N. y Millar, J. C. "Estadística y Quimiometría para Química Analítica" 4ª edición. Prentice Hall, Madrid, 2002
5. Compañó Beltrán, R. y Ríos, A. "Garantía de la calidad en los laboratorios analíticos" Síntesis, Madrid, 2002
6. Mongay Fernández, C. "Quimiometría" Universitat de València, Valencia, 2005.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA:

1. Ramis Ramos, Guillermo. Quimiometría, Síntesis, Madrid, 2001.
2. Otto, Matthias. Chemometrics: statistics and computer application in analytical chemistry, Wiley-VCH, New York, 1999.
3. Brereton, R.G. Chemometrics: applications of mathematics and statistics to laboratory systems, Ellis Horwood Limited, Chichester, England, 1990.

5-METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA Y EVALUACIÓN DURANTE EL CURSADO

METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

- Exposición por parte del/ de la profesor/a.
- Seminarios por parte de los estudiantes en algunos temas.
- Discusión dirigida de casos prácticos.

- Resolución de problemas.
- Utilización de software especializado de tipo de informativo, de simulación de procesos experimentales y para la realización de cálculos.

PROPUESTA DE EVALUACIÓN.

Contarán la participación de los estudiantes en los seminarios, en las discusiones de clase y en resolución de problemas.

Además, se proponen 2 exámenes parciales.

6- CONDICIONES DE REGULARIDAD TRAS EL CURSADO

Todas las actividades propuestas en el espacio curricular serán evaluadas.

Los/Las estudiantes deberán satisfacer los siguientes requisitos:

- Aprobar las guías de problemas, discusión de trabajos científicos y guías didácticas **con 6**.
 - Aprobar el **100%** de los exámenes parciales y seminario **con 7**.
 - En caso de desaprobado un examen parcial podrá rendir un recuperatorio debiendo aprobar con una nota suficiente para preservar la regularidad. El parcial no aprobado tendrá una sola posibilidad de recuperación.
 - En caso de ausencia a los exámenes parciales, se deberá presentar un justificativo y certificado válido. El examen perdido se rendirá en el recuperatorio no teniendo instancia de recuperación.
- En caso de irregularidades en exámenes o plagio en los informes de laboratorio, el mismo será anulado perdiendo la posibilidad de promocionar la asignatura.

7- SISTEMA DE APROBACIÓN Y/O PROMOCIÓN DEL ESPACIO CURRICULAR

Aquellos estudiantes que acrediten la regularidad, estarán en condiciones de rendir el examen final oral, en las fechas fijadas por el calendario académico.

Los estudiantes que lo deseen, se podrán acoger al sistema de **promoción** para lo cual deberán satisfacer los siguientes requisitos:

- Aprobar los exámenes parciales y seminario **con un promedio general de 8**.
- En caso de desaprobado un examen parcial podrá rendir un recuperatorio debiendo aprobar con una nota suficiente para alcanzar la condición de promoción. El parcial tendrá una sola posibilidad de recuperación.

El examen como **libre** tiene varias etapas: problemas numéricos, teoría y discusión de un trabajo científico, lo cual deberás rendir en ese orden pasando a la próxima instancia aprobando el examen correspondiente a cada etapa.

La escala de reglamentación institucional a emplear calificaciones según reglamentación vigente:

<i>Resultado</i>	<i>Escala Numérica Nota</i>	<i>Escala Porcentual %</i>
<i>No Aprobado</i>	<i>0</i>	<i>0 %</i>
	<i>1</i>	<i>1 a 12 %</i>

<i>Aprobado</i>	2	13 a 24 %				
	3	25 a 35 %				
	4	36 a 47 %				
	5	48 a 59 %				
	6	60 a 64 %				
	7	65 a 74 %				
	8	75 a 84 %				
	9	85 a 94 %				
	10	95 a 100 %				
PROMOCIONABLE			SI	X	NO	

8- CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES

FECHA	ACTIVIDAD
13 de marzo	UNIDAD 1 - INTRODUCCIÓN A LA QUIMIOMETRÍA
20 de marzo	UNIDAD 2 - CALIBRACIÓN
27 de marzo	UNIDAD 3 - RECONOCIMIENTO DE PATRONES
3 de abril	Parcial 1 (UNIDADES 1 - 3)
10 de abril	UNIDAD 4 - PROCESAMIENTO DE SEÑALES
17 de abril	
24 de abril	
1 de mayo feriado (día del trabajo)	
8 de mayo	UNIDAD 4 - PROCESAMIENTO DE SEÑALES (cont.)
15 de mayo	UNIDAD 5 - APLICACIÓN A PROBLEMAS REALES
22 de mayo	UNIDAD 6 - PRESENTE Y FUTURO DEL ANÁLISIS DE GRANDES CANTIDADES DE DATOS
29 de mayo	Parcial 2 (UNIDADES 4 - 6)

5 de junio	Recuperatorio de parciales
12 de junio	Seminarios
19 de junio	ENTREGA DE REGULARIDADES, PROMOCIONADOS, DESAPROBADOS



Jorgelina C. Altamirano



José A. D'Angelo

**FIRMA Y ACLARACIÓN
PROFESOR RESPONSABLE DEL ESPACIO CURRICULAR**