

Corresponde al Anexo I de la Resolución N° 59/01

## **ANEXO I**

**DEPARTAMENTO DE:** QUÍMICA

**ASIGNATURA:** Quimiometría

**CARRERA - PLAN:** Licenciatura en Química. Plan 1997

**CURSO:** Tercero

**RÉGIMEN:** Cuatrimestral

**CARGA HORARIA:**

\* **Teórico-Práctico:** 6 horas semanales

**CICLO LECTIVO:** 2000

**EQUIPO DOCENTE DE LA CÁTEDRA:**

Lic. María Susana Boeris, Profesor Adjunto, dedicación semiexclusiva.

Magister José Manuel Camiña, Jefe de Trabajos Prácticos, Ad Honórem

### **OBJETIVOS Y/O ALCANCES DE LA ASIGNATURA:**

- Brindar al alumno los conocimientos del uso de técnicas quimiométricas en el trabajo analítico, con el fin de mejorar la Calidad de la información química.
- Optimizar exactitud-productividad a través de la tarea experimental.
- Integrar conocimientos para formar juicio crítico y reflexivo en la toma de decisiones.

Corresponde al Anexo II de la Resolución N° 59/01

## **ANEXO II**

**DEPARTAMENTO DE:** QUÍMICA

**ASIGNATURA:** Quimiometría

**CICLO LECTIVO:** 2000

### **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. Ejemplos de aplicación.

#### **UNIDAD 3:**

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. Test Q de Dixon.

#### **UNIDAD 4:**

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 y derivadas de la normal (Función F, Función t-Student y 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.

Corresponde al Anexo II de la Resolución N° 59/01

#### UNIDAD 5:

Tratamiento estadístico de datos analíticos. Aplicaciones al control de calidad. Test de Hipótesis. Elaboración de un test de significancia. Evaluación del sesgo de un procedimiento usando test t: el caso de una muestra, el de dos muestras y el de dos muestras relacionadas (pareadas). Varianza conjunta. Test de Cochran. Comparación de varianzas. Test F. Usos de los intervalos de confianza. Presentación de resultados de un test de hipótesis. Nivel de significancia. Error de tipo I. Error de tipo II. Poder del test. Tamaño de la muestra. Test de uno y dos lados.

#### UNIDAD 6:

Control de calidad. Muestreo estadístico. Plan de muestreo. Muestreo por atributos y por variables. Control interlaboratorio. Estudio de la recuperación de un proceso analítico. 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. Cartas de sumas acumulativas.

#### UNIDAD 7:

Comparación de diversos conjuntos de resultados. Análisis de la varianza (ANOVA). Terminología y ejemplos. Estimación de las varianzas y sus significados. Anova de una vía. Descomposición de la varianza total en sus componentes. Tabla de Anova. Anova de dos vías. Test de Bartlett para comparación de mas de dos varianzas. Conclusiones analíticas que surgen de Anova.

#### UNIDAD 8:

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 9:

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 procedimientos por regresión lineal. Sensibilidad y límite de detección.

Corresponde al Anexo III de la Resolución N° 59/01

### **ANEXO III**

**DEPARTAMENTO DE:** QUÍMICA

**ASIGNATURA:** Quimiometría

**CICLO LECTIVO:** 2000

### **BIBLIOGRAFÍA**

Miller, J.C. y Miller, J.N., "Estadística para Química analítica", 2ª. ed., Addison-Wesley Iberoamericana, Wilmington, 1993.

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.

Johnson, R. "Estadística Elemental". Grupo Editorial Iberoamérica.

Cela, R. (editor). "Quimiometría Práctica". Ed. Universidad de Santiago de Compostela, España, 1994.

Otto, M. "Chemometrics: Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry". Ed. Wiley-VCH. Germany, 1999.

Adams, M.J. "Chemometrics in Analytical Spectroscopy". The Royal Society of Chemistry, Londres., 1995.

Valcárcel, M. y Rios, A. "La calidad en los laboratorios analíticos". 1ª. Ed. Reverté S.A. 1992.

Skoog, D., West, D., y Holler J. "Química Analítica". 6ª. Ed. Mc. Graw-Hill, México, 1995.

Harris, D.C. "Análisis Químico Cuantitativo". 3ª Ed. Grupo Editorial Iberoamérica. 1992.

Corresponde al Anexo IV de la Resolución N° 59/01

## **ANEXO IV**

**DEPARTAMENTO DE:** QUÍMICA

**ASIGNATURA:** Quimiometría

**CICLO LECTIVO:** 2000

### **PROGRAMA DE TRABAJOS PRÁCTICOS**

- 1.- Tratamiento de datos analíticos.
- 2.- Errores en el análisis clásico.
- 3.- Estadística de medidas repetidas. Límites de confianza.
- 4.- Pruebas de significación.
- 5.- Análisis de la varianza (ANOVA).
- 6.- Gráficos de control.
- 7.- Errores en el Análisis Instrumental. Regresión y Correlación.

Corresponde al Anexo V de la Resolución N° 59/01

## **ANEXO V**

**DEPARTAMENTO DE:** QUÍMICA

**ASIGNATURA:** Quimiometría

**CICLO LECTIVO:** 2000

### **ACTIVIDADES ESPECIALES QUE SE PREVEEN**

No se prevé ninguna actividad especial.

Corresponde al Anexo VI de la Resolución N° 59/01

## **ANEXO VI**

**DEPARTAMENTO DE:** QUÍMICA

**ASIGNATURA:** Quimiometría

**CICLO LECTIVO:** 2000

### **PROGRAMA DE EXAMEN**

Se seguirá el Programa Analítico.