

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLAN

LICENCIATURA EN: QUÍMICA.

NOMBRE DE LA ASIGNATURA: QUIMIOMETRÍA.

ÓRGANO INTERNO QUE COORDINA EL PROGRAMA DE LA ASIGNATURA:

DEPARTAMENTO DE: CIENCIAS QUÍMICAS.
SECCIÓN DE: QUÍMICA ANALÍTICA.

CICLO AL QUE PERTENECE: TERMINAL.

REQUISITO DE SERIACIÓN: NINGUNO.

CARÁCTER DE LA ASIGNATURA: OPTATIVA.

TIPO DE ASIGNATURA: TEÓRICO

MODALIDAD: CURSO.

SEMESTRE: 8°.

NÚMERO DE HORAS /SEMANA/ SEMESTRE:

TEORÍA:

3

PRÁCTICA:

N° DE CRÉDITOS:

6

CLAVE

0809

OBJETIVOS GENERALES DE LA ASIGNATURA.

Utilizar las técnicas matemáticas y estadísticas de la Quimiometría con el fin de mejorar, optimizar, monitorear y controlar la calidad de un producto industrial en proceso.

Diseñar o seleccionar los procedimientos experimentales de una manera óptima

Utilizar la Quimiometría como una herramienta para proveer la máxima calidad de información en el análisis de sus datos experimentales.

Obtener información de la máxima calidad acerca del sistema químico en estudio a través de la aplicación de diversas técnicas quimiométricas a problemas industriales específicos.

UNIDAD 1 INTRODUCCION.

Número de horas de teoría: 8.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Proporcionar un panorama general de los usos y aplicaciones de la Quimiometría a la resolución de problemas prácticos. Aplicar el álgebra de matrices al tratamiento de datos químicos y comprender su posterior representación.

Familiarizar al alumno con el software MATLAB que servirá como herramienta para la manipulación de matrices de datos y su posterior análisis numérico.

1. Introducción general del curso de Quimiometría.

1.1. Resumen general de los campos más importantes y su uso en la resolución de problemas industriales reales (Diseño Experimental, Calibración Multivariante, Reconocimiento de Patrones y Proceso de Señales).

1.2 Álgebra de matrices básica.

1.3. Introducción al software MATLAB.

UNIDAD 2 OPTIMIZACION Y DISEÑO DE EXPERIMENTOS.

Número de horas de teoría: 8

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Entender y mejorar el sistema que está bajo su estudio aplicando el diseño experimental.

Realizar la exploración y explotación de las superficies de respuesta obtenidas mediante estudios sistemáticos y modelos matemáticos.

2. Optimización y diseño de experimentos (una variable a un tiempo vs aproximación multivariante).

2.1 Definición y terminología, objetivos del diseño de experimentos, factores experimentales, selección de las respuestas, estrategias de optimización, el modelo (funciones de respuesta).

2.2 Diseños de monitoreo (fraccionados factoriales, saturados y PlackettBurman).

2.3 Diseños factoriales.

2.4 Diseños de multiniveles (respuesta lineal y cuadrática, diseños de 3 niveles, Diseños D-, A- y M- óptimos, Central composite, BoxBehnken, Doehiert).

2.5 Diseño de mezclas (Diseño lattice).

2.6 Otros métodos de optimización (Simplex, Métodos Taguchi).

2.7 Aplicación del diseño experimental a nivel industrial.

UNIDAD 3. CALIBRACION MULTIVARIANTE.

Número de horas de teoría: 8.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Construir un modelo matemático que describa la relación entre la información obtenida de una serie de medidas y la propiedad deseada.

Conocer y aplicar diversos algoritmos para llevar a cabo el análisis de regresión en la obtención del modelo de calibración.

3.1 CALIBRACIÓN (regresión lineal vs. regresión múltiple).

3.1.1 Calibración lineal.

3.1.2 Regresión lineal múltiple (MLR).

3.1.3 Regresión de componentes principales (PCR).

3.1.4 Regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS).

3.1.5 Métodos no lineales.

3.1.6 Aplicación a un problema industrial.

UNIDAD 4. RECONOCIMIENTO DE PATRONES.

Número de horas de teoría: 8.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Conocer que las técnicas de reconocimiento de patrones nos proveen de métodos automatizados para poder distinguir entre diferentes clases de datos.

Distinguir los métodos de reconocimiento de patrones no supervisados como los que intentan encontrar una estructura en los datos sin el conocimiento de la "verdadera" clasificación de las muestras, mientras los métodos supervisados definen la estructura a través de ejemplos con clasificaciones conocidas.

Aplicar el método de reconocimiento de patrones más adecuado para la resolución de un problema práctico.

4.1 Reconocimiento de patrones supervisado y no supervisado.

4.1.1 Modelo independiente no estricto de analogía de clase (SIMCA).

4.1.2 Mínimos Cuadrados Parciales (PLS).

4.1.3 Redes neuronales.

4.2 Métodos de agrupamiento (medidas de distancia y similitud, análisis de grupos).

UNIDAD 5 PROCESO DE SEÑALES .

Número de horas de teoría: 8.

OBJETIVOS DE LA UNIDAD.

Entender que la mayoría de la información química es obtenida en forma de una señal proveniente de un instrumento analítico.

Comprender que el proceso de señales cubre entonces las diferentes transformaciones o modificaciones que podemos usar en la señal analítica.

Alicar el procesamiento de señales para transformar la señal analítica de tal forma que pueda obtenerse una información química o para disminuir el ruido proveniente con la señal.

5. 1 PROCESO DE SEÑALES.

5.1.1. Transformadas de Fourier.

5.1.2. Convolución y deconvolución.

5.1.3. Filtrado de Kalman.

5.1.4. Aplicación a datos industriales.

UNIDAD 6 OTRAS TÉCNICAS QUIMIOMETRICAS.

Número de horas de teoría: 8.

OBJETIVO DE LA UNIDAD.

Que el alumno tenga un panorama general de otros métodos que pueden ser útiles en el tratamiento de datos químicos a nivel industrial.

6.1 OTRAS TÉCNICAS QUIMIOMETRICAS.

6.1.1. Inteligencia Artificial (Sistemas Expertos y su desarrollo).

6.1.2. Estimación de las Relaciones Estructura Propiedad / Actividad.

METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

- Exposición por parte del profesor.
- Seminarios por parte de los alumnos 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 alumnos en los seminarios, en las discusiones de clase y en resolución de problemas. Además se proponen de 2 a 3 exámenes parciales.

PERFIL PROFESIOGRÁFICO DEL DOCENTE.

Profesional en el área de la Química con posgrado en Química Analítica, con experiencia en docencia.

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA.

1. Massart, D.L., B.G.M. Vandeginste, L.M.C. Buydens, S. De Jong, P.J. Lewi and J. Smeyers-Verbeke. *Handbook of chemometrics and qualimetrics*, Part A, Elsevier, The Netherlands, 1997.
2. Vandeginste, B.G.M., D.L. Massart, L.M.C. Buydens, S. De Jong, P.J. Lewi and J. Smeyers-Verbeke, *Handbook of chemometrics and qualimetrics*, Part B, Elsevier, The Netherlands, 1998.
3. Hasweif, S.J. *Practical guide of chemometrics*, Marcel Dekker, New York, 1992.

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.