

UNIDAD: IZTAPALAPA		DIVISIÓN CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA	
NIVEL: LICENCIATURA		EN QUÍMICA	
CLAVE: 2141123	UNIDAD DE ENSEÑANZA - APRENDIZAJE: QUIMIOMETRÍA		TRIM: VI-XII
HORAS TEORÍA: 3	SERIACIÓN 2141101		CRÉDITOS: 9
HORAS PRÁCTICA: 3			OPT/OBL: OPT.

OBJETIVO(S):

GENERAL

- Que al final del curso el alumno sea capaz de aplicar algunos métodos de la quimiometría al tratamiento de datos experimentales.

ESPECÍFICOS

Que al final del curso el alumno sea capaz de:

- Enunciar las aplicaciones y métodos más importantes de la Quimiometría
- Evaluar la calidad de la información de un conjunto de datos experimentales, utilizando la estadística o los métodos quimiométricos.
- Describir los métodos matemáticos del análisis multivariante y calcular concentraciones y parámetros fisicoquímicos con sus incertidumbres, a partir de un conjunto de datos experimentales.

CONTENIDO SINTÉTICO:

1. Determinación de la calidad de las mediciones en la resolución de problemas experimentales.
2. Teoría de información. Procesamiento de las señales.
3. Análisis de Varianza (ANOVA).
4. Métodos de clasificación de muestras.
5. Patrones o pautas de reconocimiento.
6. Análisis de componentes principales (PCA) y análisis de factores.
7. Análisis multivariante y superficies de respuesta.
8. Regresión lineal multivariante (MLR)
9. Mínimos cuadrados no lineales.
10. Mínimos cuadrados parciales (PLS).
11. Redes Neuronales Artificiales (ANN).

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUÍMICA		2/2
CLAVE 2141123	UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE QUIMIOMETRÍA	

MODALIDADES DE CONDUCCIÓN DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:

- La exposición de la teoría se basará principalmente en conferencia o clase magistral y cuando juzgue conveniente podrá usar demostraciones (experiencias de cátedra). Se hará énfasis en los aspectos conceptuales y en las aplicaciones; se procurará usar ejemplos tomados de varias disciplinas.
- Por práctica se entenderá la realización de sesiones de taller o laboratorio de cómputo o laboratorio de experimentación. En las sesiones de taller se buscará que el alumno elabore un acervo personal de métodos y estrategias para la solución de problemas.
- El profesor debe conducir tanto las sesiones de teoría como las de taller.

MODALIDADES DE EVALUACIÓN:

Evaluación Global:

- Se realizarán al menos dos evaluaciones periódicas. Los alumnos que aprueben las evaluaciones periódicas no presentarán una evaluación terminal. El resultado final será el promedio simple de las evaluaciones practicadas.

Evaluación de Recuperación:

- El curso podrá acreditarse mediante una evaluación de recuperación, que podrá ser global o complementaria a juicio del profesor.

BIBLIOGRAFÍA NECESARIA O RECOMENDABLE:

1. Brereton R. G., *Chemometrics. Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant*, Wiley. Great Britain, 2003.
2. Hibbert D.B. and Gooding J.J., *Data Analysis for Chemistry*, Oxford , USA 2006.
3. Massart, D.L.; Vandeginste, B.G.M.; Deming, S.N.; Michotte, Y.; Kaufman, L., *Chemometrics: a textbook*. Elsevier. Amsterdam. 1988.
4. Miller J.N. and Miller J.C., *Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry*, 5ª Edition, Pearson. Great Britain, 2005.