

Universidad Tecnológica de la Mixteca
Clave DGP 506597
Maestría en Ciencias: Productos Naturales y Alimentos



PROGRAMA DE ESTUDIOS

NOMBRE DE LA ASIGNATURA

Quimiometría

CICLO	CLAVE DE LA ASIGNATURA	TOTAL DE HORAS
Segundo Semestre	180206	85

OBJETIVO (S) GENERAL(ES) DE LA ASIGNATURA

Aplicar metodologías de análisis multivariado para el tratamiento estadístico de datos físicoquímicos y espectroscópicos obtenidos en la cuantificación de analitos y en la identificación simultánea de metabolitos secundarios.

TEMAS Y SUBTEMAS

1. Evaluación estadística de datos

- 1.1 Fuentes de error
- 1.2 Precisión y exactitud
- 1.3 Propiedades de la distribución normal
- 1.4 Prueba de significancia
- 1.5 Análisis de varianza
- 1.6 Valores atípicos

2. Datos multivariantes

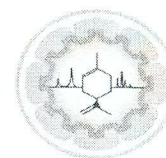
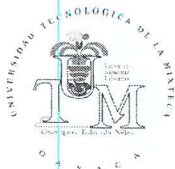
- 2.1 Definiciones
- 2.2 Preprocesado básico
- 2.3 Covarianza y correlación
- 2.4 Distancias y similitudes
- 2.5 Identificación multivariable atípica
- 2.6 Variables lineales latente.

3. Análisis de componente principal (PCA)

- 3.1 Conceptos
- 3.2 Número de componentes PCA
- 3.3 Centrado y escalado
- 3.4 Algoritmos para PCA
- 3.5 Evaluación y diagnóstico
- 3.6 Métodos complementarios para análisis exploratorio de datos
- 3.7 Ejemplos

4. Calibración

- 4.1 Calibración univariable
- 4.2 Calibración lineal múltiple
- 4.3 Regresión de componente principal



PROGRAMA DE ESTUDIOS

4.4 Mínimos cuadrados parciales

4.5 Validación de modelo

5. Diseño de experimentos

5.1 Principios básicos

5.2 Diseño factorial

5.3 Diseño de superficies de respuesta

5.4 Diseños de mezcla

5.5 Optimización simplex

ACTIVIDADES DE APRENDIZAJE

Exposición por parte del maestro; revisiones de artículos con ejemplos del uso de técnicas estadísticas para el análisis de datos multivariable. Así como el uso de software para llevar a cabo la ejemplificación de la aplicación de métodos de análisis multivariable.

CRITERIOS Y PROCEDIMIENTOS DE EVALUACIÓN Y ACREDITACIÓN

Instrumentos formales y prácticos de evaluación: exámenes parciales y examen final. El alumno presentará artículos de investigación, relacionados con los temas abordados en el curso. La calificación generada de los exámenes corresponderá al 50% de la calificación y el otro 50% a las presentaciones de artículos.

BIBLIOGRAFÍA (TIPO, TÍTULO, AUTOR, EDITORIAL, AÑO)

Básica:

Practical Guide to Chemometrics. Paul Gemperline, Taylor and Francis, 2006.

Introduction to Multivariate Statistical Analysis in Chemometrics. Kurt Varmuza, Peter Filzmoser, CRC Press, 2009.

Chemometrics. Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant. Richard Brereton, Wiley, 2003.

A Practical Guide to Scientific Data Analysis. David Livingstone, Wiley, 2009.

Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry. James N. Miller, Jane Charlotte Miller. Pearson Education Canada, 2010, 6th edition.

Consulta:

Practical Statistics for the Analytical Scientist: A Bench Guide (Valid Analytical Measurement). Peter Bedson, Trevor J. Duguid Farrant, William A. Hardcastle. RSC Publishing, 2009.

Multivariate Calibration. Harald Martens and Tormod Naes. Wiley, 1992.

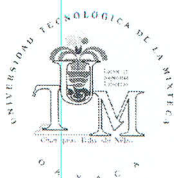
Chemometrics. Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry. Matthias Otto. Wiley-VCH, 2007.

Chemometrics. Muhammad A. Sharaf, Deborah L. Illman and Bruce R. Kowalski. Wiley, 1986.

A User's Guide to Principal Components. J. Edward Jackson. Wiley, 2003.

PERFIL PROFESIONAL DEL DOCENTE (Esta función la llevará a cabo el director del proyecto)

Doctor en química adscrito al Núcleo Académico Básico del Programa de Maestría en Ciencias: Productos Naturales y Alimentos.



Universidad Tecnológica de la Mixteca

Clave DGP 506597

Maestría en Ciencias: Productos Naturales y Alimentos



0028

PROGRAMA DE ESTUDIOS

Vo. Bo.

DR. JOSÉ ANÍBAL ARIAS AGUILAR
JEFE DE POSGRADO



DIVISION DE ESTUDIOS
DE POSGRADO

AUTORIZO

DR. AGUSTÍN SANTIAGO ALVARADO
VICE-RECTOR ACADÉMICO

