



UNIVERSIDAD SIMÓN BOLÍVAR
Vicerrectorado Académico

1. Departamento: *QUIMICA*

2. Asignatura: Introducción a la Quimiometría

3. Código de la asignatura: QM2515

No. de unidades-crédito: 2

No. de horas semanales: Teoría 1 Práctica Laboratorio 2

4. Fecha de entrada en vigencia de este programa: 2008

5. OBJETIVO GENERAL:

En este curso se desarrollan los fundamentos del tratamiento de datos experimentales, mediante el empleo de herramientas de cálculo científico, numérico y simbólico. También se contemplan los fundamentos de la adquisición de datos, que resultan de la detección de señales producidas por instrumentos empleados en la experimentación química.

6. OBJETIVOS ESPECÍFICOS:

- Explorar las herramientas computacionales disponibles para el análisis de la información proveniente de la experimentación
- Aplicación de diversas metodologías para la implementación del análisis de datos experimentales
- Utilizar la simulación computacional para predecir resultados experimentales
- Adquisición de datos experimentales

7. CONTENIDOS

1.- Funciones avanzadas en hojas de cálculo. (1 sesión)

- * Operadores: aritméticos, lógicos, referenciales, textuales
- * Referencias: absolutas, relativas, mixtas, externas. Nombres y etiquetas.
- * Funciones: Matemáticas, estadísticas, lógicas, fecha y hora, texto, arreglos y matrices

2.- Métodos numéricos. (3 sesiones)

- * Interpolación: lineal, cúbica
- * Derivación
- * Integración
- * Ecuaciones diferenciales
- * Álgebra de matrices
- * Cálculo de las raíces de ecuaciones: método gráfico, aproximaciones sucesivas, Newton-Raphson.
- * Resolución de sistemas de ecuaciones lineales

3.- Ajustes de funciones a datos experimentales y análisis de modelos químicos. (1 sesión)

- * Regresión lineal
- * Regresión no lineal:

4.- Casos de estudio. (3 sesiones)

- * Análisis de datos cinéticos: Reacciones de primer y segundo orden. Reacciones consecutivas
- * Análisis de datos espectro-fotométricos: Análisis de mezclas. Desconvolución de espectros complejos.
- * Simulación de cinéticas por integración numérica: Solución de ecuaciones diferenciales por el Método de Runge Kutta.

5.- Análisis de problemas químicos usando herramientas de cálculo simbólico. (1 sesión).

- * Introducción al uso de herramientas de cálculo simbólico

6.- Casos de estudio. (3 sesiones).

- * Análisis cinético
- * Análisis de sistemas cinéticos complejos
- * Transformada de Fourier y su aplicación a la instrumentación espectroscópica
- * Instrumentación y análisis de señales instrumentales:
- * Tratamiento matemático de señales: Introducción al filtrado digital de señales

8. ESTRATEGIAS METODOLÓGICAS, DIDACTICAS O DE DESARROLLO DE LA ASIGNATURA:

*Clases taller de tres horas de duración en el Laboratorio de Informática Química.

*Los alumnos disponen de una computadora individual y se trabajan en conjunto la teoría y los ejemplos.

*Material para el curso que será facilitado al inicio de cada sesión y/o estará disponible en la sección de documentos de aula virtual

9. ESTRATEGIAS DE EVALUACIÓN:

La evaluación será en base a tareas individuales por sesión.

10. FUENTES DE INFORMACIÓN:

Excel for chemists, a comprehensive guide, 2a edicion, Joseph Billo, Wiley-VCH, New York, 2001. ISBN 0 471394629

The Chemistry Maths Book, Erich Steiner, Oxford University Press, New York, 1996. ISBN 0198559143

A MathCad primer for Physical Chemistry, M.P. Cady y C.A. Trapp, Oxford University Press, 1999. ISBN 0198503598

A. Noogle, J. , Physical Chemistry Using MathCad, Pine Creek Pub., 1997. ISBN: 0965584909

Handbook of mathematics and computational chemistry, J. Harris y H. Stocker. Springer-Verlag, New York, 1998. ISBN 0387947469