Guía docente de la asignatura

Quimiometría (M43/56/4/12)

Fecha de aprobación por la Comisión Académica: 04/07/2025

Máster	Máster Universitario en Ciencias y Tecnologías Químicas, Khemia
MÓDULO	• Producción, Ensayo y Calidad • Metodologia e Instrumentación
RAMA	Ciencias
CENTRO RESPONSABLE DEL TÍTULO	Escuela Internacional de Posgrado

Semestre	Primero	Créditos	3	Tipo	Optativa	Tipo de enseñanza	Presencial

PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES

- Se recomienda que el estudiante disponga de ordenador portátil o similar.
- No se permite el uso de herramientas de IA para el desarrollo de la asignatura, independientemente de este prerrequisito se recomienda al estudiante que de forma general debe adoptar un uso ético y responsable de las mismas. Se deben seguir las recomendaciones contenidas en el documento de "Recomendaciones para el uso de la inteligencia artificial en la UGR" publicado en esta ubicación: https://ceprud.ugr.es/formacion-tic/inteligencia-artificial/recomendaciones-ia#contenidoo

BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (Según memoria de verificación del Máster)

Diseño experimental aplicado a la optimización de procesos químicos. Análisis exploratorio de datos, herramientas para la predicción y la clasificación: Métodos para el reconocimiento de pautas (PRMs). Métodos no supervisados (NSPRMs): Análisis de Clústers (CA), Análisis de componentes principales (PCA), Análisis Factorial (AF). Otros métodos no supervisados. Métodos supervisados (SPRMs): Análisis Discriminante (AD). Calibración multivariable. Huellas dactilares instrumentales: Preprocesado de datos.

COMPETENCIAS

COMPETENCIAS BÁSICAS

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 06/05/2026 - 11:00
Código seguro de verificación (CSV): C828D49B409CDC6F31324C5C4C9645D6 Pág. 1 de 8

- CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

COMPETENCIAS GENERALES

- CG01 - Que los estudiantes sepan asumir las responsabilidades adecuadas en lo que respecta al desarrollo de conocimientos y/o prácticas profesionales

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE02 - Aplicar conocimientos teórico-prácticos a la resolución de problemas científico-técnicos relacionados con las ciencias y tecnologías químicas.
- CE03 - Comprender, analizar y solucionar problemas avanzados relacionados con la Química mediante el uso de las herramientas y metodologías aprendidas.
- CE11 - Conocer las principales herramientas, de naturaleza estadística y computacional, aplicables a la manipulación de datos y a la extracción de la información química valiosa, pero no evidente, contenida en dichos datos

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT02 - Capacidad de gestión del tiempo (referida a su organización y planificación)
- CT04 - Conocimiento y uso de las tecnologías de la información y comunicación (TICs) y de los recursos informáticos (programas, bases de datos, etc.) relativos al ámbito de estudio para adquirir, gestionar y comunicar la información
- CT06 - Trabajo en equipo

COMPETENCIAS

COMPETENCIAS BÁSICAS

- CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/
Código seguro de verificación (CSV): C828D49B409CDC6F31324C5C4C9645D6
06/05/2026 - 11:00
Pág. 2 de 8

- CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

COMPETENCIAS GENERALES

- CG01 - Que los estudiantes sepan asumir las responsabilidades adecuadas en lo que respecta al desarrollo de conocimientos y/o prácticas profesionales

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE02 - Aplicar conocimientos teórico-prácticos a la resolución de problemas científico-técnicos relacionados con las ciencias y tecnologías químicas.
- CE03 - Comprender, analizar y solucionar problemas avanzados relacionados con la Química mediante el uso de las herramientas y metodologías aprendidas.
- CE11 - Conocer las principales herramientas, de naturaleza estadística y computacional, aplicables a la manipulación de datos y a la extracción de la información química valiosa, pero no evidente, contenida en dichos datos

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT02 - Capacidad de gestión del tiempo (referida a su organización y planificación)
- CT04 - Conocimiento y uso de las tecnologías de la información y comunicación (TICs) y de los recursos informáticos (programas, bases de datos, etc.) relativos al ámbito de estudio para adquirir, gestionar y comunicar la información
- CT06 - Trabajo en equipo

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Objetivos)

Al cursar esta materia el alumno será capaz de:

- Conocer los conceptos fundamentales del diseño de experimentos y los métodos formales de optimización.
- Describir los principales tipos de diseños y establecer la metodología necesaria para su utilización.
- Aplicar las técnicas formales de optimización.
- Conocer y diferenciar las técnicas multivariable como herramientas del análisis exploratorio de datos experimentales.
- Conocer los objetivos de los diferentes niveles del reconocimiento de pautas (no supervisado o supervisado) con el fin de poder seleccionar la técnica multivariable adecuada a un problema/caso concreto.
- Utilizar las componentes principales (PC) y los varifactores (VF) como herramientas fundamentales para explorar e interpretar las fuentes de variabilidad asociadas a los

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/
Código seguro de verificación (CSV): C828D49B409CDC6F31324C5C4C9645D6
06/05/2026 - 11:00
Pág. 3 de 8

datos evaluados.
- Utilizar los principales métodos de reconocimiento de pautas no supervisados (ACJ, ACP y AF) como herramientas adecuadas para generar e interpretar conclusiones a partir de las variables experimentales estudiadas.
- Conocer y aplicar los métodos de reconocimiento de pautas supervisados (clasificación, modelado o regresión) comprobando la bondad del modelo mediante procedimientos de validación adecuados.
- Conocer las aplicaciones y restricciones de la regresión lineal parcial por mínimos cuadrados (PLS) en análisis multivariable.
- Reconocer la huella dactilar instrumental.
- Conocer y aplicar los principales métodos de preprocesado de datos multivariable.

PROGRAMA DE CONTENIDOS TEÓRICOS Y PRÁCTICOS

TEÓRICO

I. Introducción a la Quimiometría. Concepto, origen y tendencias. La Quimiometría en las diferentes etapas del proceso analítico. Clasificación de las técnicas quimiométricas. Campos de aplicación.

II. Diseño experimental aplicado a la optimización de procesos químicos. Diseño de experimentos: Tipos. Análisis estadístico del modelo. Optimización experimental. Funciones de respuesta instrumental y superficies de respuesta. Análisis de modelos cuadráticos.

III. Análisis exploratorio de datos, herramientas para la predicción, discriminación y clasificación. La matriz de datos multivariable. El análisis exploratorio de datos (EDA): Análisis de Componentes Principales (PCA). Análisis de Factores (FA). Métodos para el reconocimiento de pautas (PRM). Métodos no supervisados (NSPRM): Generalidades. Métodos supervisados (SPRM): Generalidades.

IV. Métodos no supervisados (NSPRM). Información sobre el agrupamiento natural de la matriz de datos. Procedimientos para la normalización de la matriz de datos. Análisis de Clusters. Análisis de Componentes Principales (PCA). Análisis de Factores (FA). Otros métodos no supervisados.

V. Métodos supervisados (SPRM). Información buscada: Clasificación, modelado o regresión. Análisis Discriminante. Principales métodos de modelado. Parámetros de calidad. Principales métodos de clasificación. Parámetros de calidad.

VI. Calibración multivariable. Concepto, necesidad y aplicación. Regresión lineal múltiple (MLR). Mínimos cuadrados clásicos (CLS). Mínimos cuadrados inversos (ILS). Regresión por componentes principales (PLS).

VII. La huella dactilar instrumental. Definición. Tipos de huellas dactilares instrumentales. Etapas implicadas en la utilización de huellas dactilares instrumentales. Pretratamientos de la señal. Etapas implicadas en el modelado de huellas dactilares instrumentales: Establecimiento del modelo, validación interna, validación externa. Parámetros de calidad.

PRÁCTICO

Estudio de casos asociados al contenido teórico establecido en el apartado anterior.

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 06/05/2026 - 11:00
Código seguro de verificación (CSV): C828D49B409CDC6F31324C5C4C9645D6 Pág. 4 de 8

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL

- Miller, James N.; Miller, Jane C.; Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry, (6th Ed.); Pearson Education Limited: England, 2010.
- Montgomery, D. C.; "Design and Analysis of experiments" 4ª edición, John Wiley & Sons, New York, 1997.
- Brereton, Richard G.; Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant; John Wiley & Sons, Chichester, 2007.
- Brereton, Richard G.; Applied Chemometrics for Scientists; John Wiley & Sons, Chichester, 2007.
- Brereton, Richard G.; Chemometrics for Pattern Recognition. John Wiley & Sons, Chichester, 2009.
- Varmuza, Kurt; Filzmoser, Peter; Introduction to multivariate statistical analysis in chemometrics; CRC Press, Boca Raton (Fl, USA), 2008.
- Smilde, A.; Bro, R.; Geladi, P.; Multi-way Analysis in Chemistry and Related Fields; John Wiley & Sons, Ltd: Chichester, 2004.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Artículos y revisiones del estado del arte propuestos por el equipo docente/profesor.

ENLACES RECOMENDADOS

http://www.eigenvector.com/resources.htm

http://www.statgraphics.com/training/default.aspx

http://www.spectroscopynow.com/chemo

http://www.chm.bris.ac.uk/org/chemometrics/chemometrics.html

Estos enlaces están activos a fecha de la publicación "on-line" de la Guía Docente

METODOLOGÍA DOCENTE

- MD01 Clases magistrales/expositivas. El equipo docente podrá utilizar para su desarrollo algunos de los siguientes métodos: sesión expositiva, aprendizaje basado en problemas, ejemplificación y estudio de casos.
- MD02 Clases de resolución de problemas. El equipo docente podrá utilizar algunos de los siguientes métodos para su desarrollo: Aprendizaje basado en problemas; ejemplificación y estudio de casos.
- MD03 Clases prácticas. El equipo docente podrá recurrir a métodos como estudio de casos, análisis diagnósticos, prácticas de laboratorio, aula de informática, visitas, búsqueda de datos, etc.
- MD04 Talleres, seminarios, debates, exposición (y/o defensa) de trabajos individuales o en grupo. El equipo docente podrá utilizar para su desarrollo algunos de los siguientes métodos: aprendizaje basado en problemas, ejemplificación y estudio de casos

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 06/05/2026 - 11:00
Código seguro de verificación (CSV): C828D49B409CDC6F31324C5C4C9645D6 Pág. 5 de 8

- MD05 Tutorías: Programadas y de seguimiento (para trabajos de fin de Máster y Prácticas de Empresa), pudiéndose utilizar en las modalidades personalizada o en grupo, sincrónica (presenciales) o asincrónica (virtuales). La modalidad seleccionada por el equipo docente quedará recogida en la Guía Docente de cada materia
- MD07 Estudio y trabajo autónomo, individual y/o en grupo

EVALUACIÓN (instrumentos de evaluación, criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final)

EVALUACIÓN ORDINARIA

El artículo 17 de la Normativa de Evaluación y Calificación de Estudiantes de la Universidad de Granada establece que la convocatoria ordinaria estará basada preferentemente en la **evaluación continua del estudiante**, excepto para quienes se les haya reconocido el derecho a la evaluación única final.

- **Instrumentos de evaluación:**

- **Pruebas escritas.** Exámenes o pruebas breves a realizar a lo largo del curso basadas en la resolución de ejercicios, casos o problemas propuestos con anterioridad por el profesor. Su formato (preguntas largas, cortas, pruebas respuesta múltiple, etc.) será seleccionado por el equipo docente encargado de impartir la materia. Su contenido y duración serán establecidos de acuerdo con la Normativa de Evaluación y Calificación aprobada por la UGR en Consejo de Gobierno de 20 de Mayo de 2013.

- **Evaluación de asistencia y participación activa.** Se basa en la valoración de actitudes e iniciativas de participación activa e interactiva en el desarrollo de la clase, en las tutorías, o en el grado de compromiso en el desarrollo de los trabajos planificados, en las prácticas de aula o cualquier otra tarea asignada, pudiéndose evaluar, si procede, la capacidad de trabajo en equipo.

- **Clases Prácticas de Aula.** Se evaluará el grado de desempeño en el manejo de software, análisis e interpretación de datos experimentales y elaboración de registros e informes de resultados.

- **Resolución de ejercicios o proyectos.** Proyecto o ejercicio complejo que, el alumno o grupo de alumnos, deberá ir resolviendo por etapas a lo largo del curso. Cada etapa o hito alcanzado será evaluado y el alumno recibirá retroalimentación sobre su éxito o fracaso.

- **Criterio de evaluación y porcentajes sobre la evaluación final**

- Conocimientos teóricos adquiridos (**40%**)

- Valoración de actitudes e iniciativas de participación activa e interactiva en el desarrollo de la clase, en las tutorías, o en el grado de compromiso en el desarrollo de los trabajos planificados (**10%**)

- Desempeño en el manejo de software, análisis e interpretación de datos experimentales y elaboración de registros e informes de resultados (15%)

- Resolución de ejercicios o proyectos (**15%**)

- Exposición de trabajos, informes, conclusiones mediante workshop (**20%**)

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 06/05/2026 - 11:00
Código seguro de verificación (CSV): C828D49B409CDC6F31324C5C4C9645D6 Pág. 6 de 8

Cuando el estudiante haya realizado actividades y pruebas del mproceso de evaluación continua contempladas en la presente guia docente que constituyan más del 50% del total de la ponderaciónde la calificación final de la asignatura, su calificación final en el acta figurará con la calificación correspondiente. Si es inferior al 50% la calificación del estudiante en el acta aparecerá como "NO PRESENTADO".

EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

El artículo 19 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que los estudiantes que no hayan superado la asignatura en la convocatoria ordinaria dispondrán de una convocatoria extraordinaria. A ella podrán concurrir todos los estudiantes, con independencia de haber seguido o no un proceso de evaluación continua. De esta forma, el estudiante que no haya realizado la evaluación continua tendrá la posibilidad de obtener el 100% de la calificación mediante la realización de una prueba y/o trabajo.

- **Instrumentos de evaluación:**

- **Prueba escrita.** Exámen basadas en la resolución de ejercicios, casos o problemas. Su formato (preguntas largas, cortas, pruebas respuesta múltiple, etc.) será seleccionado por el equipo docente encargado de impartir la materia. Su contenido y duración serán establecidos de acuerdo con la Normativa de Evaluación y Calificación aprobada por la UGR en Consejo de Gobierno de 20 de Mayo de 2013.

- **Criterio de evaluación y porcentajes sobre la evaluación final**

- Conocimientos teórico/prácticos adquiridos (**100%**)

EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

El artículo 8 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que podrán acogerse a la evaluación única final aquellos estudiantes que por causas justificadas no puedan cumplir con el método de evaluación continua.

Para acogerse a esta modalidad de evaluación, el estudiante DEBERÁ SOLICITARLA a la Coordinación del Máster a través del procedimiento electrónico. El periodo de solicitud deberá estar incluido en cualquiera de los periodos o circunstancias que se indican a continuación:

- en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura,
- en las dos semanas siguientes a su matriculación (si esta se ha producido con posterioridad al inicio de las clases)
- por causas sobrevenidas.

Una vez recibida la solicitud, la Coordinación del Máster dará traslado de la misma al profesorado correspondiente, indicando y acreditando las razones que asisten al estudiante para no poder seguir el sistema de evaluación continua.

Los instrumentos, criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final son los mismos que los establecidos para la evaluación extraordinaria.

INFORMACIÓN ADICIONAL

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 06/05/2026 - 11:00
Código seguro de verificación (CSV): C828D49B409CDC6F31324C5C4C9645D6 Pág. 7 de 8

Siguiendo las recomendaciones de la CRUE y del Secretariado de Inclusión y Diversidad de la UGR, los sistemas de adquisición y de evaluación de competencias recogidos en esta Guía Docente se aplicarán conforme al principio de diseño para todas las personas, facilitando el aprendizaje y la demostración de conocimientos de acuerdo a las necesidades y la diversidad funcional del alumnado.

Información de interés para estudiantado con discapacidad y/o Necesidades Específicas de Apoyo Educativo (NEAE): Gestión de servicios y apoyos (https://ve.ugr.es/servicios/atencion-social/estudiantes-con-discapacidad).

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/
Código seguro de verificación (CSV): C828D49B409CDC6F31324C5C4C9645D6
06/05/2026 - 11:00
Pág. 8 de 8