



Sociedad Española de Química Analítica
<http://www.seqa.es>

Nº 1, Septiembre 2002

BOLETÍN

de la SOCIEDAD ESPAÑOLA de QUÍMICA ANALÍTICA
Publicación trimestral de la SEQA

Información becas JAI. Visite nuestra página web: <http://www.seqa.es>

Indice

1. **Presentación.**
C. Cámara y M. C. Moreno
2. **Declaración de Bolonia:
¿¿¿modificar nuestros
"nuevos planes de
estudio?!!.**
E. Barrado
3. **La Química Analítica y
Europa.** *G. Rauret*
4. **Primer Ejercicio de
Intercomparación para
Estudiantes de Química
Analítica.**
A. Sahuquillo
5. **La Quimiometría en la
Química Analítica.**
Rafael Cela
6. **El doctorado en España.**
M. Valcárcel
7. **Libros.**
8. **Congresos.**

1. PRESENTACIÓN DEL BOLETIN

Queridos compañeros: como ya indicó el Presidente de Nuestra Sociedad, Prof. Juan Cacho, en el último número de Química Analítica, la revista de la Sociedad se ha fusionado con otras revistas europeas en la recientemente aparecida Analytical, and Bioanalytical Chemistry "ABC".

Por ello, ante la necesidad de encontrar un nuevo vehículo de comunicación con los Socios, la Junta directiva de la SEQA ha decidido publicar, con carácter trimestral, un Boletín que nos permitirá "estar al día" de los distintos aspectos de interés para la Comunidad Analítica en nuestro país. La filosofía con la que nace el nuevo boletín es la de servir como plataforma y foro abierto de discusión sobre aspectos tales como: planes de estudio (tanto de la licenciatura como del tercer ciclo), perspectivas en distintas áreas de investigación, congresos u actividades promovidas por la SEQA, etc

Estamos en un momento de cambio y por tanto sería muy positivo emplear el boletín como herramienta de información e intercambio de ideas para que, entre todos, la Química Analítica española continúe manteniendo un lugar destacado en el contexto internacional. Resultaría muy conveniente que a través de la web de la sociedad se mantenga una comunicación interactiva con los Socios y que se envíen sugerencias, artículos de interés, novedades, información sobre libros, congresos, etc.

El Boletín **"es de todos y por tanto depende de la contribución de todos los socios"**. Inicialmente, nosotras nos haremos cargo de su elaboración (a partir de la información recibida) y esperamos que pronto haya candidatos para continuar con esta labor.

Carmen Cámara y M^a Cruz Moreno

2. Declaración de Bolonia: ¿¿¿modificar nuestros "nuevos planes de estudio"???

Enrique Barrado

Departamento de Química Analítica. Facultad de Ciencias

47004. Valladolid. E-mail: ebarrado@qa.uva.es

Durante los últimos 10 años hemos alumbrado en prácticamente todas las Universidades españolas "nuevos planes" de estudios, con una gestación harto dificultosa en muchos casos, especialmente porque la normativa se iba adaptando a la casuística y no a la inversa.

Sin embargo, debemos considerar la enseñanza universitaria inmersa en un proceso de cambio y adaptación permanente, que tienda a su actualización y mejora continua. Solo desde esta perspectiva podremos aceptar el hecho de que antes del 2010 deberemos readaptar nuestros "nuevos planes" a la denominada "Declaración de Bolonia", cuyo objetivo (refrendado por los ministerios de los países de la UE) es el desarrollo armónico de un "Espacio Europeo de Educación Superior".

Se trata de que los programas académicos de los distintos países sean convergentes, asegurando una calidad docente y un sistema de transferencia (ECTS, European Credit Transfer System) que permita el reconocimiento mutuo de titulaciones, la movilidad entre países y una concepción docente que implica un "aprendizaje a lo largo de toda la vida" [1].

La Declaración de Bolonia incluye entre sus principales objetivos [2]:

- La adopción de un **sistema fácilmente legible y compatible de titulaciones**, mediante la implantación, entre otras cosas, de un Suplemento al Diploma...
- La adopción de un sistema basado, fundamentalmente, en **dos ciclos principales**, pregrado y grado... El título otorgado al terminar el primer ciclo (semejante al Bachelor), tendrá que tener un valor específico en el mercado de trabajo Europeo... El segundo ciclo llevará a la obtención de un Master y/o Doctorado (¿?).
- El **establecimiento de un sistema de créditos**, como el sistema ECTS
- La **promoción de la cooperación Europea para asegurar un nivel de calidad para el desarrollo de criterios y metodologías comparables**
- La promoción de una necesaria **dimensión Europea en la educación superior** con particular énfasis en el desarrollo curricular...

Esto supone un cambio de filosofía que requiere un intenso trabajo de adaptación, en orden a cambiar la metodología didáctica y la concepción de los planes de estudio.

Además, creo que el momento es adecuado, ya que al contrario que en el pasado próximo, nos encontramos con una reducción objetiva del número de alumnos, consecuencia de los cambios en la pirámide poblacional y en el aumento de titulaciones y Universidades.

En opinión de Pagani y González [2], los principales puntos a tener en cuenta en España, para alcanzar una adaptación del sistema actual de **docencia y créditos**, serían, en una **primera fase**:

- La **implantación de un sistema de créditos europeos**
- La **adopción de un sistema de calificaciones que permitan una conversión fácil** al sistema de calificaciones y grados ECTS
- La **implantación del Suplemento al Diploma**

En una **segunda fase** y como consecuencia de la implantación del sistema europeo de créditos, se debería considerar:

- La posible revisión e introducción de **nuevos currícula** basados en contenidos y competencias
- La **definición de los contenidos y el perfil profesional** por áreas de conocimiento
- La **homogeneidad en titulaciones del mismo tipo** (área) para todo el territorio nacional
- La valoración de los **niveles de calidad** (parámetros transnacionales)

(Más información en la web: <http://www.uma.es/servicios/internac/cdw/default.htm> a partir de la cual puede accederse a las que se citan como referencia en este trabajo).

Sin embargo, es posible que, dados los avances que hemos realizado en los últimos años en las áreas experimen-

tales, y especialmente en los "nuevos planes de estudios de Química", tal vez pueda invertirse este orden.

Por tanto, creo que deberíamos comenzar a debatir los perfiles profesionales, los conocimientos de Química Analítica que requieren los problemas actuales y previsibles en un futuro próximo y a partir de ahí proponer unos contenidos mínimos exigibles para todas las carreras de Química y relacionadas con ella, a nivel del estado español.

Y para iniciar el debate, opino que, por lo que se refiere a la docencia, deberemos, por ejemplo, explicar más (y probablemente mejor) los conceptos y menos el desarrollo, más las técnicas y menos los métodos. Exigir los presupuestos que requieren las asignaturas prácticas y considerar su verdadera importancia, y no como en algunos casos, "prácticas de otras asignaturas".

Establecer claramente el esfuerzo que requiere cada parte, diseñar y elaborar referencias basadas en las nuevas tecnologías, que ayuden al estudio, y no sean mera traslación a la red de los libros clásicos etc.

Y, en lo que respecta a las competencias, deberemos atender las recomendaciones de los profesionales de los sectores implicados. Según la FEIQUE (Federación Empresarial de la Industria Química Española) [3], en el perfil del profesional de la industria química debe considerarse:

- Buena formación básica que sirva de soporte para las especializaciones y para afrontar los cambios
 - Dominio de uno o más idiomas
 - Conocimientos generales sobre otras disciplinas técnicas, económicas y sociales
 - Talante humano que permita actuar de forma integrada y armónica en grupos de trabajo
 - Disponibilidad de traslados y reconversión propia
- Puede ser un buen punto de partida para hacer que esta vez los desarrollos necesarios se hagan con lógica y exentos de "outliers" (chapuzas).

Referencias

- [1] <http://www.uma.es/servicios/internac/cdw/ConsUniv2001.ppt>
- [2] <http://www.uma.es/servicios/internac/cdw/CRUEdoctorado.rtf>
- [3] <http://www.feique.org/>

3. La Química Analítica y Europa

Gemma Rauret

Catedrática de Química Analítica de la UB y socia fundadora de la SEQA.

Un tema constante de debate en los encuentros de los químicos analíticos europeos ha sido la escasa presencia de la Química Analítica en los planes de estudio y el reducido número de cátedras en esta disciplina en las universidades europeas.

El caso español era distinto pero no gratuito.

Recuerdo todavía los enérgicos debates que se vivieron en las universidades con motivo de los últimos cambios de plan de estudios y los esfuerzos que hicieron los responsables de la Sociedad Española de Química Analítica para convencer de la necesidad de incluir esta disciplina como un aspecto fundamental en la formación a los químicos.

Actualmente estamos en vías de que se produzca un nuevo cambio. La declaración de Bolonia para la creación del espacio europeo de educación superior está avanzando a buen ritmo.

Se está perfilando la descripción de los aspectos característicos de lo que debe ser un "bachelor" y un "master". Para algunos títulos, incluida la titulación de "bachelor" en Química, se ha trabajado para establecer lo que debería ser el núcleo curricular de la titulación en el ámbito europeo. El procedimiento empleado es indiscutible.

Quince universidades de los distintos países europeos han puesto en común sus planes de estudio y han debatido sus contenidos.

El resultado final es una propuesta que establece los conocimientos y las competencias que debe adquirir un futuro titulado. Esta propuesta se hizo pública el pasado 30 de mayo del 2002.

Este núcleo curricular, lógicamente, refleja lo que ya sabíamos: la química analítica no ocupa un buen lugar en los planes de estudio europeos.

Delante de esta situación debemos actuar de nuevo y liderar un proceso que lleve a convencer, con evidencias y a quien haga falta, de la necesidad de dar al futuro "bachelor" en Química una formación sólida en Química Analítica, tanto por lo que aporta a su capacidad para la resolución de problemas como por representar una baza importante para su inserción laboral.

Es un nuevo reto para todos nosotros, que como en casos anteriores debemos canalizar a través de la Sociedad Española de Química Analítica, entendiendo que una sociedad la forman sus asociados y que, además de la confianza, debemos aportar nuestra colaboración activa a los que en este momento tienen la responsabilidad de dirigir la Sociedad Española de Química Analítica.

4. Primer Ejercicio de Intercomparación para Estudiantes de Química Analítica

Angels Sahuquillo

Departament de Química Analítica, Universitat de Barcelona. Av. Diagonal 647, 08028 Barcelona

Durante el curso académico 2001-2002, y con el objetivo de estimular la formación en el uso de herramientas de evaluación y mejora de la calidad en los laboratorios de análisis, se ha llevado a cabo el primer ejercicio de intercomparación para estudiantes de Química Analítica en las Universidades españolas.

La organización del ejercicio la llevó a cabo el Departament de Química Analítica de la Universitat de Barcelona, en colaboración con la Universidad Complutense de Madrid, la Universidad de Córdoba y la Universidad de Huelva.

Se suministraron a los participantes dos materiales de referencia, un suelo agrícola y una muestra de cerveza, preparados en el laboratorio de preparación de materiales de referencia de la Facultat de Química de la Universitat de Barcelona.

Dicho laboratorio realizó también los estudios de homogeneidad y estabilidad de los materiales, y envió las muestras solicitadas por cada Centro participante.

Con el objetivo de familiarizar a los estudiantes con los Métodos Oficiales de Análisis, se llevó a cabo la determinación de nutrientes (fósforo y potasio extraíbles), y pH y conductividad en la muestra de suelo siguiendo dichos Métodos.

En la muestra de cerveza se determinó el contenido de etanol aplicando el método establecido en cada uno de los Centros.

Para cada parámetro, se facilitaron a los participantes unos intervalos de valores establecidos a partir de los análisis llevados a cabo por los Centros colaboradores con la organización.

Se ha contado con la participación entusiasta de 17 Universidades que han llevado a cabo la determinación de uno, varios o todos los parámetros propuestos.

La mayoría de los estudiantes participantes han sido de la licenciatura de Química y de la licenciatura de Ciencias Ambientales.

El ejercicio interlaboratorio se ha realizado dentro de distintas asignaturas (por ej. Experimentación Química, Análisis Instrumental, Análisis Aplicado, Análisis de Alimentos, etc) y en algún caso ha constituido el trabajo de licenciatura de los estudiantes, o se ha realizado dentro de asignaturas de tercer ciclo.

Para el tratamiento estadístico de los datos se pidieron tres resultados de cada parámetro en cada muestra y se consideraron todos los resultados recibidos, sin realizar ningún test de rechazo de resultados.

Para cada parámetro se representó la media y la desviación estándar obtenida en cada muestra, la media de las medias y la media de las medias con las desviaciones estándar correspondientes.

La distribución de resultados de los estudiantes es comparable a las obtenidas en los ejercicios de intercomparación

que usualmente se llevan a cabo entre laboratorios de análisis.

La iniciativa ha sido valorada muy positivamente tanto por la organización como por los Centros participantes. Independientemente de la bondad de los resultados obtenidos respecto al resto de Centros, se ha valorado como una herramienta de innovación docente por parte de los profesores que han conseguido tanto un elevado grado de implicación de los estudiantes para obtener resultados de calidad, como potenciar su responsabilidad en la toma de decisiones.

5. La Quimiometría en la Química Analítica

Rafael Cela

Grupo de Cromatografía y Quimiometría

Departamento de Química Analítica, Nutrición y Bromatología

Instituto de Investigación y Análisis Alimentario

Universidad de Santiago de Compostela

(Tel.: 981-563100 Extn 14271,

E-mail: qnrctd@usc.es)

La Química Analítica se ha caracterizado históricamente por aprovechar de modo admirable y creativo los avances de otras Ciencias, así como de la Tecnología. De alguna manera, la Química Analítica es una Ciencia bajo permanente presión, de modo que los problemas nunca resultan completamente resueltos. Tan pronto creemos haber alcanzado nuestro objetivo, apreciamos que las exigencias han crecido de manera que el objetivo debe ser modificado y expandido para dar respuesta a tales nuevas exigencias.

Esta sensación de actuar siempre a la zaga de los problemas, del convencimiento de que existen o pueden desarrollarse nuevas herramientas que nos permitirán resolverlos de una forma más eficaz, de que para encontrar esas herramientas probablemente tendremos que abandonar la comodidad de lo conocido para adentrarnos en terrenos que no solo no dominamos sino que, en muchos casos, nos son completamente extraños, nos lleva frecuentemente a colaborar con científicos que raramente han considerado la posibilidad de relacionarse con la Química Analítica porque su campo parece no tener puntos de conexión con ella.

Todo esto genera un modelo de comportamiento investigador particular en los analíticos que, en ocasiones, provoca incluso la incredulidad e incompreensión de otros colegas de la Química, cuyo trabajo parece mucho más claramente acotado, consistente en el tiempo y en la metodología y por tanto, más fácil de definir.

Entre otros, uno de esos campos poco explorado todavía por la Química Analítica es la aplicación de las herramientas que en términos generales se engloban en lo que denominamos Inteligencia Artificial.

La pregunta, claro está, es ¿nos hacen falta tales herramientas?, o ¿qué tipo de problemas nos ayudarán a resolver de una forma mejor?.

Para ninguna de las dos preguntas existe en este momento una respuesta contundente o por lo menos suficientemente soportada.

Parece razonable suponer que algunas de tales herramientas, o quizá todas ¿porqué no?, puedan ser útiles de uno u otro modo en facetas particulares de la Química Analítica pero, será necesario identificar problemas concretos en los que tales herramientas aporten soluciones más eficaces para poder demostrar que efectivamente, merece la pena explorar ese terreno reconocámoslo, extraño y en muchos aspectos hostil por la matemática que implica.

Ciertamente, algunas de tales herramientas han sido ya exploradas e incorporadas al acervo de la Quimiometría.

Dentro de sus posibilidades, el grupo de Cromatografía y Quimiometría de la Universidad de Santiago de Compostela entre otros, ha decidido hace ya varios años intentar la exploración de algunas rutas poco transitadas en ese nuevo territorio e identificar líneas de aplicación para las herramientas que ha logrado entender y poner en práctica.

Algunos de estos estudios han alcanzado ya un grado de madurez considerable y pueden exponerse públicamente.

Otros, por el contrario, se hallan en un estado tan primitivo que resultaría excesivamente aventurado afirmar su viabilidad.

La primera de estas herramientas consiste en los denominados algoritmos evolutivos. Un algoritmo evolutivo trata de mimetizar los principios de la evolución natural para desarrollar procedimientos efectivos de búsqueda y optimización.

La Química Analítica ha utilizado convencionalmente diversos procedimientos de optimización, puesto que uno de sus objetivos fundamentales es lograr procesos de medición óptimos que produzcan la máxima calidad de información. Sin embargo, los algoritmos evolutivos difieren de los procedimientos clásicos de optimización (uní o multivariantes) en diversos aspectos.

En primer lugar, los procedimientos clásicos tienen en común la evaluación de una solución única en cada iteración y para decidir cual será el próximo experimento a efectuar se utilizan fundamentalmente reglas de transición determinísticas.

Cualquiera de estos procesos trata de resolver los enormes inconvenientes del modo de trabajo mediante prueba y error, tan arraigado a la intuición personal como ineficaz desde un punto de vista práctico.

En su mayoría, estos procedimientos clásicos parten de una solución cualquiera (elegida de modo aleatorio si no se dispone de información previa acerca de cuáles pueden ser las condiciones favorables de trabajo) y trata de avanzar hacia el óptimo considerando la información local disponible.

Es decir, partiendo de los datos disponibles hasta el momento, el procedimiento trata de localizar la dirección más prometedora en el espacio de búsqueda.

Puesto que dicha dirección se estima a partir de un grupo reducido de elementos de información, debe ser testada a cada nuevo experimento y redefinirse eventualmente para poder alcanzar efectivamente las condiciones óptimas.

En un amplio grupo de técnicas las decisiones se toman de forma directa (por evaluación de la respuesta del sistema obtenida mediante una función de error o de calidad y, eventualmente, por consideración de las restricciones impuestas al problema desde el punto de vista práctico o experimental). En otro grupo de técnicas las decisiones se obtienen en base a los gradientes (primeras o segundas derivadas de la función objetivo o de las restricciones).

Este segundo grupo de técnicas es considerablemente más rápido en cuanto a la convergencia en una solución final y por tanto, el esfuerzo experimental es considerablemente menor.

Este es un aspecto que importa al analítico, puesto que el esfuerzo experimental en procesos de optimización puede ser considerable, y por tanto el costo asociado, lo que dificulta notablemente este tipo de opciones cuando se trabaja en ambientes de rutina o control donde la presión de la actividad diaria deja pocas posibilidades para abordar tales procesos. Sin embargo, está claro que es en este tipo de ambientes donde resulta más importante trabajar con procedimientos optimizados, robustos y fiables a lo largo del tiempo.

Como contrapartida, los métodos de gradiente son mucho más exigentes desde un punto de vista matemático ya que exigen la continuidad y diferenciabilidad de las funciones objetivo, cosa que en los problemas analíticos reales raramente está garantizado.

Además, convergen con facilidad en óptimos locales (es decir, secundarios y por tanto no-óptimos).

Otra dificultad añadida para el químico analítico es que tales procedimientos deben diseñarse de acuerdo con el problema a resolver. Una cierta técnica puede resultar muy eficaz para un cierto problema y fracasar rotundamente en otro problema diferente. Este aspecto debe tenerse en cuenta, puesto que exige que el analítico adquiera una experiencia y especialización razonables en tales procedimientos para su aplicación eficaz.

Es aceptable que el analítico se aventure fuera de las fronteras de su experiencia usual, pero no puede pretenderse que se especialice en otros campos para mejorar su propio trabajo analítico.

Una interesante alternativa a estas técnicas son los algoritmos evolutivos, cuyos representantes mejor conocidos son los denominados algoritmos genéticos, desarrollados en 1975 por John H. Holland en la Universidad de Michigan, Ann Arbor, y popularizados tras la publicación de la monografía de David E. Goldberg (*Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*, Addison-Wesley, reading, MA, 1989).

Durante la última década los algoritmos genéticos han sido aplicados de forma extensa a una gran variedad de problemas científicos, de ingeniería, económicos y comerciales, quedando claras sus tres características diferenciales: *amplia aplicabilidad, facilidad de uso y comprensión, perspectiva global*.

La idea revolucionaria de Holland residió en incorporar los procesos que parecen regir la evolución de las especies en el planeta y que han intrigado a los biólogos desde la aceptación de la teoría de evolución en un sistema algorítmico. Los mecanismos que rigen la evolución no han sido completamente descifrados pero algunos aspectos son suficientemente bien conocidos.

La evolución tiene lugar en los cromosomas, los dispositivos que codifican la estructura de los seres vivos, y no en los propios seres vivos.

Sin embargo, la selección natural actúa en las estructuras resultantes de la decodificación (los seres vivos).

Los individuos que mejor se adaptan al medio tienen mayores probabilidades de sobrevivir y eventualmente reproducirse.

Se asume que una porción importante del individuo reside en el mensaje genético recibido y por tanto, la selección natural tiene como consecuencia que los cromosomas que conducen a estructuras exitosas se reproduzcan con más frecuencia que los restantes.

El proceso de reproducción provoca que los descendientes obtengan cromosomas incorporando características de los progenitores. La mezcla puede producir mejores o peores estructuras. En el primer caso, la evolución actuará de modo positivo y los descendientes manifestarán una adaptación mejorada al medio.

Eventualmente, una mutación puede alterar el código de los cromosomas, de modo que se produzca un individuo diferente, mejor o peor adaptado al medio.

Además, la evolución biológica no dispone de memoria. La capacidad de adaptación al medio de los individuos que se obtengan en sucesivas generaciones está escrita en el pool genético, es decir en el conjunto de cromosomas que portan los individuos de cada generación, así como en la estructura de los decodificadores de los cromosomas.

Si las estructuras biológicas en el planeta se han mostrado capaces de competir y adaptarse con éxito a un medio francamente hostil, parece razonable que un algoritmo que logre incorporar estos hechos en estructuras matemáticas debería resultar igualmente exitoso frente a problemas complejos. Los algoritmos genéticos efectivamente incorporan las ideas anteriormente resumidas.

En un proceso de optimización, cada cromosoma codifica un conjunto de parámetros experimentales mediante algún alfabeto apropiado (binario en los inicios de la técnica y actualmente real, cada vez con mayor frecuencia).

Cuando ese experimento se ejecuta, o simula adecuadamente, estamos ante el individuo que ha expresado el cromosoma.

El resultado se evalúa en términos de mayor o menor éxito frente al problema, mediante una función objetivo, usualmente denominada función de fitness. De este modo, los diferentes individuos en la población durante la generación actual pueden ordenarse. Si pensamos en términos del espacio de búsqueda, los mejores individuos son aquellos que están situados más cerca del óptimo. Como siempre, por tanto, trabajamos con dos espacios diferentes.

El espacio de los parámetros experimentales, generalmente multidimensional, en donde cada experimento viene representado por un punto y cuyo vector de posición es precisamente el cromosoma, y el espacio de la(s) respuesta(s) que puede ser mono o multidimensional.

El trabajo del analítico es localizar el conjunto de parámetros en el primero de los espacios que hacen máxima la respuesta en el segundo.

La teoría de los algoritmos genéticos ha sido bien descrita ya en numerosas monografías y se incluye en las versiones más modernas de los textos de quimiometría. No es por tanto una herramienta desconocida para muchos químicos analíticos.

Sin embargo, el número de aplicaciones en nuestra disciplina es todavía bastante limitado. Ciertamente se han empleado como selectores de características en procesos de regresión multivariada, tanto utilizando regresión PLS como empleando redes neurales artificiales.

También se han aplicado al propio entrenamiento de las redes neurales en diversos problemas de interés analítico, sis-

temas de mapeado no lineal, etc., pero existe una limitación inherente que dificulta su aplicabilidad a procesos de optimización experimentales.

Una de las ventajas básicas de un algoritmo evolutivo frente a las técnicas convencionales que mencionábamos al principio es el hecho de trabajar siempre con un conjunto (población) de soluciones simultáneamente en cada generación y no con una solución única.

Esta característica dota al algoritmo de capacidades de búsqueda formidables y especialmente de una enorme robustez de cara a la localización del óptimo global, pero tiene una contrapartida evidente.

Si cada solución debe ser evaluada experimentalmente, el esfuerzo experimental que exige este tipo de estrategia resulta claramente prohibitivo. Una solución obvia a esta dificultad consiste en trabajar mediante simulación.

Si podemos disponer de un modelo que simule de forma suficientemente aproximada nuestro sistema experimental, entonces el problema es de esfuerzo de cálculo y no de esfuerzo experimental. La situación cambia entonces radicalmente y los algoritmos evolutivos se convierten en herramientas formidables en manos del analítico.

En nuestro grupo, este tipo de planteamiento se ha desarrollado para el caso de la optimización de separaciones cromatográficas.

La primera etapa es modelar la retención de los compuestos en el sistema cromatográfico considerado (en nuestros estudios, HPLC con sistemas binarios y ternarios de disolventes).

Cuando se ha logrado un buen modelo de retención, el algoritmo evolutivo lo utiliza para mimetizar los procesos experimentales. Los cromosomas son los programas de elución que decodifican a cromatogramas simulados mediante el modelo previamente disponible.

Los operadores genéticos de cruce y mutación, especialmente adaptados al problema, aunque compartiendo los elementos básicos comunes a cualquier algoritmo genético se encargan de que el sistema pueda explorar la superficie de respuesta de forma efectiva a la vez que explotar las mejores soluciones disponibles en cada momento.

El resultado final es una herramienta práctica en el laboratorio analítico que ahorra al cromatografista días o semanas de trabajo cuando debe desarrollar un método para muestras complejas.

El sistema ha evolucionado hasta el punto de permitir la optimización multiobjetivo y con ello se hace aún más potente, a la vez que libera al cromatografista de la dependencia histórica con las denominadas funciones de respuesta cromatográficas (CRFs) que, frecuentemente no se ajustan de forma plena a los objetivos del trabajo real.

Por otro lado, los algoritmos evolutivos son excelentes herramientas de regresión robusta. En nuestro laboratorio se han empleado para resolver los sistemas de ecuaciones que producen las matrices de diseño sobresaturadas.

Este tipo de matrices no habían encontrado aplicaciones prácticas reales hasta la fecha y se mantenían como una propuesta que había despertado el interés teórico de los estadísticos, especialmente durante la pasada década.

Entre otras razones, las dificultades para la resolución de los sistemas sobresaturados y la necesidad de asumir condiciones en las que el denominado principio Pareto fuera aplicable a los problemas a tratar, disuadían a los experimentadores de su utilización.

La Química Analítica, como en otras muchas ocasiones proporciona situaciones y problemas que permiten la utilización de nuevas herramientas.

Durante los últimos años el grupo ha venido trabajando en una nueva estrategia para la composición de muestras que resulta útil en estudios de tipo ambiental o de seguridad alimentaria y que aplica matrices de diseño sobresaturadas y su resolución mediante regresión asistida por algoritmos evolutivos.

Esencialmente, se trata de formar muestras compuestas no por simple mezcla de los especímenes originales de la campaña de muestreo, la mayoría de los cuales probablemente no manifiestan una composición anómala en la mayoría de las campañas de screening, sino mediante un diseño específico que hace uso de una matriz de diseño sobresaturada.

Cuando las muestras compuestas así obtenidas se analizan y registran los resultados, el proceso continúa resolviendo el sistema de ecuaciones obtenido.

El resultado es un estimado de las concentraciones para las especies de interés en los especímenes originales que no solamente identifica cuál o cuáles de ellos realmente presentaban contaminación, sino también en qué nivel de concentración.

Esta es la diferencia fundamental con los sistemas convencionales de composición de muestras.

En ese caso, únicamente es posible a partir de las muestras compuestas saber si alguno (o varios) de los especímenes involucrados en la muestra compuesta en cuestión estaban contaminados, pero no sabremos cuantos ni cuáles de ellos realmente lo estaban hasta que no hayamos analizado de modo individual todos los especímenes.

En la nueva aproximación, esta información se obtiene sin necesidad de analizar los especímenes de modo individual en ningún caso y además, el número de determinaciones analíticas realizadas es inferior (a veces en un factor de superior a tres veces) al número de especímenes originales muestreados, de modo que el ahorro en tiempo, trabajo y costo convierte esta herramienta en un elemento de utilidad en estudios de screening.

En la práctica, creemos que esta es la primera aplicación real (no solamente en Química Analítica) de las matrices de diseño sobresaturadas y de su resolución mediante algoritmos evolutivos.

Nótese que una misma herramienta (los algoritmos evolutivos) ha sido aplicada a dos problemas analíticos radicalmente diferentes.

Son dos ejemplos de cómo ciertas herramientas de computación natural pueden contribuir decisivamente a resolver nuevos y viejos problemas de la Química Analítica y como esta disciplina aporta problemas y retos suficientemente complejos y atractivos como para poner a prueba la capacidad de real de esas técnicas.

Algunas otras técnicas, como por ejemplo los sistemas inmutarios artificiales o los algoritmos de colonias de hormigas y otros, esperan que la curiosidad de los químicos analíticos explore su potencial aplicabilidad.

La colaboración con científicos del campo de la Ciencia de la Computación e Inteligencia Artificial, las Matemáticas, etc., permitirán una más efectiva exploración de estos nuevos senderos.

La colaboración entre los propios químicos analíticos será igualmente fundamental. Uno de los objetivos declarados por quienes han asumido la tarea de lanzar este boletín, una vez desaparecida como revista científica autónoma la Química Analítica, es proporcionar un elemento físico para favorecer la comunicación, el intercambio de ideas y potenciar la colaboración entre los químicos analíticos españoles. Un objetivo que no solo es deseable, sino estrictamente necesario.

La posibilidad de que los grupos de investigación en la Química Analítica española dediquen unas líneas a comunicar sus ideas e inquietudes, las direcciones en las que se están moviendo, etc., puede contribuir al establecimiento de colaboraciones y al intercambio de experiencias.

Tras años en los que la estructura de la Universidad española nos ha llevado, por la vía de la endogamia, a la formación de grupos cada vez más cerrados, la comunicación adquiere un efecto terapéutico innegable.

6. El Doctorado en España

Miguel Valcárcel

Universidad de Córdoba

Recientemente se ha publicado (<http://www.univ.mecd.es>) (página principal) un estudio sobre el doctorado en España realizado por un comité de expertos (E. García Sánchez (USAL), Francisco Michavila (UPM), Mario de Miguel (UOV), José Ginés Mora (UEVEG), Xavier Rius (URV) y Miguel Valcárcel (UCO) coordinador).

Este estudio se ha basado en documentos previos, una encuesta a las Comisiones de Doctorado a la que han contestado un 88% de las mismas, y dos encuentros de Presidentes de Comisiones de Doctorado en el contexto de la técnica METAPLAN, que han tratado dos temas transversales: financiación y calidad.

De esta información se ha generado un diagnóstico del estado actual del doctorado en España y se han definido sus principales fortalezas y debilidades.

En la última parte del estudio se han desarrollado detalladamente 27 propuestas de mejora dirigidas a las universidades, gobiernos autonómicos y gobierno central, que afectan a la organización de estos estudios, su financiación, el diploma de estudios avanzados (DEA), la movilidad en la fase de enseñanza e investigación, la evaluación de las tesis doctorales, los sistemas para asegurar la calidad de estos estudios, la gestión y la modificación del decreto regulador.

Uno de los problemas más relevantes de estos estudios es su escaso reconocimiento en el seno de las universidades, salvo honrosas excepciones. En más de un 50% de las universidades no se reconoce plenamente la labor docente del profesorado.

En más de un 90% no es reconocida la actividad de enseñar a investigar tanto en la iniciación como en la dirección de tesis doctorales.

Otras problemáticas bien definidas son la gran dispersión de programas (2800 en el curso académico 2000-2001), la complejidad administrativa involucrada, la escasa discriminación en la evaluación de las tesis doctorales (95% calificadas de sobresaliente "cum laude"), las dificultades administrativas para gestionar programas interdepartamentales, interuniversitarios e internacionales, la escasa movilidad (especialmente en la fase de investigación), la falta de apoyo económico específico para las actividades de doctorado, las escasas salidas profesionales de los doctores, la débil relación con empresas públicas y privadas, etc.

No cabe duda de la necesidad de un punto de inflexión en la evolución del doctorado en España. El Real Decreto Regulador 778/98 no ha mejorado sustancialmente la situación y ha complicado los trámites administrativos. Por otra parte, hay que contemplar la convergencia europea en educación superior nacida de la Declaración de Bolonia, así como el

gran papel que puede tener España en Iberoamérica si se hace un planteamiento serio, contundente y más generoso del que se ha realizado hasta ahora.

Además, debe tenerse presente el mundo asiático, que es una fuente potencial de doctorandos, como es en Estados Unidos.

Es, pues, necesario un nuevo texto legal que minimice todos los inconvenientes reseñados y potencie estos estudios para que su importancia en las universidades españolas sea parangonable a la que tienen en otros países desarrollados. Ahora es el momento oportuno.

La discriminación paulatina del número de alumnos que ingresan en las universidades españolas como consecuencia del descenso demográfico que debe conducir a una apuesta más firme por los estudios de doctorado.

La calidad de estos estudios debe garantizarse de forma sistemática. Además de los procesos de autorregulación (autoevaluación y evaluación externa) aplicados actualmente a las titulaciones, los programas de doctorado deberán ser acreditados por la Agencia Nacional de Evaluación de la Calidad y Acreditación (ANECA) y por las Agencias de calidad que se creen en las CCAA.

Estos sistemas de calidad supondrán una mejora de los estudios de doctorado y un estímulo importante, ya que la financiación deberá discriminarse en función de los niveles alcanzados en un conjunto de indicadores de calidad. Por último, cabe la reflexión de por qué se defienden tesis doctorales de alta calidad y los programas de doctorado son modélicos, pese a que el marco legal y administrativo no es el adecuado. La explicación es sencilla. Esta calidad se basa en el prestigio, categoría y financiación de los grupos de investigación que soportan al doctorado, pese a las dificultades reales. La calidad del doctorado en España se basa actualmente en una aproximación bottom-up.

No cabe duda que un enfoque top-down generará beneficios sinérgicos.

7. LIBROS

FOSFORESCENCIA MOLECULAR ANALÍTICA: UNA APROXIMACIÓN ANALÍTICA

A. Fernández, S. G. Shulman, Editorial Universidad de Granada (2001)

El interés científico de los autores que han contribuido en la elaboración de la presente monografía ha sido dar una visión general de la técnica fosforimétrica partiendo de aspectos básicos hasta llegar a los más novedosos, todos ellos orientados a disponer de una herramienta práctica para el análisis de sustancias en los muy diversos campos de la Química Analítica. El libro consta de diez capítulos en los que se ha intentado establecer un cierto orden cronológico basado en el desarrollo histórico de las aplicaciones analíticas de la fosforimetría.

El primero de los capítulos está dedicado a los aspectos físico-químicos de la espectroscopía de fosforescencia para introducir al lector en los diferentes procesos involucrados en la emisión molecular. En el segundo se lleva a cabo una visión exhaustiva de la evolución histórica de esta técnica espectroscópica ya de gran valor en el campo de la Química Analítica. Para una mejor comprensión de la técnica ha sido necesario introducir un tercer capítulo dedicado a Instrumentación, en donde se indica el papel decisivo jugado por las lámparas pulsantes y los detectores a tiempo definido y el uso actual de láseres y nuevos detectores. En el cuarto se recoge la primera metodología de observación de emisiones fosforescentes a temperatura ambiente, es decir, la fosforescencia en soporte sólido.

La determinación de sustancias inorgánicas por técnicas fosforimétricas ha sido posible gracias a la obtención de cristalloforos activados con iones de tierras raras y otros iones y, también, a la de complejos fosforescentes o a la atenuación de la fosforescencia que producen especies inorgánicas sobre reactivos orgánicos. Cronológicamente hablando, el sexto capítulo aborda la primera metodología fosforescente a temperatura ambiente en disolución. Ella se basa en el empleo de unas moléculas huésped denominadas ciclodextrinas y en este estudio se pormenoriza el desarrollo y empleo de estas sustancias y las distintas aplicaciones analíticas que su uso extendido ha permitido en los últimos años.

El empleo de medios micelares y microemulsiones revolucionaron la forma de llevar a cabo las medidas fosforescentes y todo lo concerniente a su empleo, definiciones y aplicaciones analíticas queda resumido en el capítulo séptimo. La posibilidad de observación de señal fosforescente sin necesidad de medios organizados da como resultado la última metodología aparecida en el campo de las aplicaciones analíticas de la fosforimetría como es la señal inducida por átomo pesado y que queda reflejada en el contenido del capítulo octavo.

El noveno capítulo de esta monografía ha querido abordar un aspecto muy importante y, hasta hace poco tiempo, bastante limitado en las técnicas luminiscentes como era su acoplamiento a sistemas dinámicos de análisis, lo cual ha sido posible tras la introducción de las diferentes metodologías en disolución. La creciente demanda de técnicas de análisis químico rápidas, incluso a tiempo real está llevando al desarrollo de dispositivos que llevan incorporadas fases sensoras y que permiten determinaciones selectiva e "in situ" de numerosos analitos de interés. El empleo de estos sensores ópticos mediante el uso de la técnica fosforescente y sus múltiples aplicaciones futuras se aborda en el décimo y último capítulo.

8. CONGRESOS



Con el patrocinio de la SEQA, cuyos socios tuvieron un descuento de 60 Euros en la cuota de inscripción, se ha celebrado en Valladolid el VII INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON ANALYTICAL METHODOLOGY IN THE ENVIRONMENTAL FIELD, entre los días 20 y 22 de Marzo.

Este symposium, que nació por iniciativa de Perkin-Elmer y Mapfre y del que se encarga hace años la AEST (ASSOCIATION OF ENVIRONMENTAL SCIENCES AND TECHNIQUES), ha contado en esta ocasión, además de los citados con la ayuda organizativa y/o financiera de otros organismos públicos y privados, como los Ministerios de Ciencia y Tecnología y Medio-Ambiente, las Consejerías de Educación y Cultura y de Medio Ambiente de la Junta de Castilla y León, las Universidades de Valladolid y de les Illes Balears, el Instituto Universitario de Medio Ambiente de la Universidade da Coruña, el Ayuntamiento de Valladolid, Intoxcal (Instituto de Toxicología de Castilla y León), AGBAR (Aguas de Barcelona), Aguas de Valladolid y Tirme.

En el programa se incluyeron genéricamente secciones dedicadas al "Agua", "Aire", "Alimentos y Bebidas" y "Metodología Analítica", sobre las que se han impartido 6 conferencias plenarias y 27 comunicaciones orales invitadas, por parte de científicos de diversas áreas (químicos, ingenieros químicos, físicos etc.) que han puesto de manifiesto las nuevas necesidades analíticas en diversos campos, atmosférico, tratamiento de aguas residuales, agroalimentario etc.

Igualmente se presentaron 128 comunicaciones en forma de posters, entre los que se asignaron cuatro premios:

- Premio Perkin Elmer para un estudio de la persistencia del insecticida Dimilin 45 ODC a un grupo del Departamento de Ingeniería Química y Medioambiental de la Universidad del País Vasco
- Premio AEST a un estudio sobre sílice cristalina de la fracción respirable, a un grupo de FREMAP Mutua de Madrid
- Premio MAPFRE a los estudios realizados dentro de una red de monitorización de aguas de lluvias, presentado por dos grupos gallegos, uno del Laboratorio del Medio Ambiente de la Xunta de Galicia, y otro del Departamento de Química Analítica del campus de Lugo
- Premio MAPFRE al análisis del Glifosato mediante cromatografía de afinidad a un grupo del Departamento de Química de la Universidad de Gerona.

En total se pueden contabilizar 250 congresistas, lo que da una idea del éxito que ha alcanzado el symposium y la tremenda preocupación que existe por los problemas ambientales así como la enorme contribución de la Química Analítica en la detección y control de problemas.



Durante los días 4 y 5 de Abril de 2002 se celebró en Sitges la V Reunión Nacional del Grupo de Espectroscopía Analítica (GEA) de la Sociedad Española de Química Analítica (SEQA), auspiciado por la propia sociedad y la Universidad Autónoma de Barcelona y que contó con el patrocinio de las firmas Perkin-Elmer, FOSS NirSystems, Mettler-Toledo, Massó Analítica, ICE de la UAB y del Ministerio de Ciencia y Tecnología. En un ambiente amable y distendido los 65 participantes tuvimos la ocasión de intercambiar opiniones y proyectos en relación a la situación actual de la Espectroscopía tanto en el ámbito académico como en el industrial. Se presentaron 4 Conferencias Plenarias, 12 Comunicaciones Orales y 35 Carteles que se distribuyeron en tres grupos mayoritarios constituidos por Técnicas y/o Métodos Atómicos, Moleculares y Quimiometría aplicados a la resolución de diferentes aspectos tanto básicos como de naturaleza aplicada en los campos medio-ambientales, alimentario, farmacéutico, industria química, etc.

Los participantes tuvimos la oportunidad de disfrutar de la calidez y encanto de Sitges con la visita a la población, particularmente del Palau Maricel, y a la comarca del Penedés con a visita a las Cavas Codorniu.

Particular interés despertó la Asamblea del Grupo por las implicaciones sobre la continuidad del mismo con la creación de la Sociedad de Espectroscopía Aplicada (SEA); la pregunta clave que se planteó fue: ¿Tiene sentido la existencia de sociedades y grupos especializados, con actividades solapadas, en un ámbito científico reducido como es el español?. Del debate conjunto de la SEQA y de la SEAs deducirá el futuro del GEA y la conveniencia de la continuidad de las reuniones científicas independientes o conjuntas. Por el momento se propuso al Dr. Santiago Maspoch como interlocutor con la SEA y su posible incorporación a la junta de la SEA en el desarrollo de temas comunes.



Buscar soluciones es nuestro objetivo.
Porque hay gente esperando buenas
noticias.

Thermo Electron, líder en el suministro a laboratorios analíticos le ofrece soluciones adaptadas a sus necesidades. Desde la preparación de la muestra hasta la interpretación de resultados, podemos equiparle con la instrumentación más tecnológicamente avanzada. Desde una simple pipeta hasta un laboratorio completo, Thermo Electron dispone de los instrumentos y la tecnología necesaria para ayudarle.

Visítenos en : www.thermo.com

en España : Tlno.-916574930 -Fax .-916574937

e-mail : comercial@thermo.es

Un líder en Ciencias de la Vida y Laboratorio

Thermo
ELECTRON CORPORATION