

Grado en Química

27211 - Estadística e informática

Guía docente para el curso 2011 - 2012

Curso: 2, Semestre: 1, Créditos: 6.0

Información básica

Profesores

- **José Antonio Adell Pascual** adell@unizar.es
- **María Beatriz Lacruz Casaucau** lacruz@unizar.es
- **María Pilar Lasala Calleja** lasala@unizar.es
- **Jorge Lloret Gazo** jlloret@unizar.es
- **María Antonia Zapata Abad** mazapata@unizar.es

Recomendaciones para cursar esta asignatura

Dado el carácter de formación básica que tiene la asignatura, no tiene ningún requisito esencial.

Es recomendable haber aprobado (o, al menos, cursado) la asignatura Matemáticas que se imparte en primer curso.

Es recomendable, aunque no imprescindible, el manejo a nivel de usuario de un procesador de textos y conocimientos informáticos básicos. También es recomendable un nivel básico de inglés técnico.

Para su estudio es recomendable asistir a las clases teóricas y prácticas, que facilitan la comprensión de los conceptos y las técnicas que conforman el cuerpo de aprendizaje, así como el estudio, reflexión y esfuerzo continuado, que puede ser reforzado con las tutorías.

Actividades y fechas clave de la asignatura

- Inicio y final de las clases teóricas (1 o 2 horas por semana a lo largo del cuatrimestre) y prácticas (2 o 3 horas por semana en grupos reducidos a lo largo del cuatrimestre), en el día señalado por el calendario oficial que se puede consultar la página web de la Facultad de Ciencias (<http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>) o la página MOODLE de la asignatura.
- La realización de las pruebas globales (ver Evaluación) pueden consultarse en la página web de la Facultad de Ciencias (<http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>) o la página MOODLE de la asignatura.

Inicio

Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

El estudiante, para superar esta asignatura, deberá demostrar los siguientes resultados...

- 1:** Identifica las características que determinan las prestaciones de un ordenador.
- 2:** Resuelve problemas de tratamiento de información, utilizando hojas de cálculo.
- 3:** Resuelve problemas de tratamiento de información mediante programación.
- 4:** Analiza y modeliza conjuntos de datos desde los puntos de vista descriptivo e inferencial, y de interpretar los resultados.
- 5:** Resuelve problemas sencillos de cálculo de probabilidades.
- 6:** Utiliza correctamente un programa estadístico de tratamiento de datos.
- 7:** Realiza estudios de datos químicos reales y de elabora informes técnicos.

Introducción

Breve presentación de la asignatura

La asignatura **Estadística e Informática** se encuadra en el módulo básico. Es de carácter obligatorio y se imparte en el primer semestre del segundo curso del grado. Su carga lectiva es de 6 ECTS (25 horas de clases teóricas presenciales, 35 horas de clases prácticas presenciales en grupos reducidos y 90 horas de trabajo personal y tutorías). Su objetivo general es el de dotar a los estudiantes de algunos conocimientos básicos de Estadística e Informática, especialmente aquellos más directamente relacionados con el aprendizaje de la Química, que serán necesarios en otras asignaturas del grado así como en su futura vida profesional.

Contexto y competencias

Sentido, contexto, relevancia y objetivos generales de la asignatura

La asignatura y sus resultados previstos responden a los siguientes planteamientos y objetivos:

La asignatura **Estadística e Informática** tiene como objetivo que el alumno aprenda a manejar las herramientas estadísticas e informáticas necesarias en Química. Se pretende que, a partir del conocimiento de sus contenidos, el alumno afiance el método científico como práctica profesional. El alumno deberá aprender a definir un problema, recoger y procesar datos y analizarlos estadísticamente eligiendo las herramientas informáticas y estadísticas más adecuadas, con el propósito de elaborar conclusiones o tomar decisiones a partir del análisis realizado. También aprenderá a analizar de forma crítica los estudios de este tipo realizados por otras personas.

Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

La materia forma parte del módulo básico, dedicado a que el estudiante sea capaz de conocer y aplicar los conceptos, principios, leyes, modelos y teorías de las diferentes disciplinas científicas básicas para la Química. Además de la materia **Estadística e Informática**, que se imparte en el primer semestre del segundo curso, este módulo básico está compuesto por las siguientes materias (impartidas durante el primer curso): Química (Química General e Introducción al Laboratorio Químico), Matemáticas, Física, Biología y Geología. Por tanto, representa la base necesaria para que el estudiante pueda

enfrentarse al resto de materias y módulos de que consta el Grado en Química.

El sentido de esta asignatura es dirigir al estudiante en el conocimiento científico de la profesión y proporcionarle los fundamentos metodológicos para poder afrontar aspectos relacionados con la informática y el análisis estadístico en asignaturas de cursos más avanzados.

Respecto a la parte de Informática, es evidente la necesidad de conocimientos y habilidades en el uso de las tecnologías de la información para el correcto desarrollo del ejercicio profesional en la sociedad actual. Los futuros químicos deben poseer las habilidades necesarias para utilizar con profesionalidad aplicaciones informáticas actuales. En concreto, se pretende que el alumno conozca la necesidad y utilidad de los ordenadores para la resolución de problemas de tratamiento de información. Para ello es importante conocer las posibilidades que ofrecen las hojas de cálculo para diseñar soluciones a problemas que requieren el tratamiento de datos químicos que recopilen en el desarrollo de su actividad. Además, ante ciertas situaciones puede ser necesario el desarrollo de programas a medida, que resuelvan problemas concretos.

La importancia de que un futuro graduado en Química tenga unos conocimientos estadísticos básicos también es clara, dado que la Química es una ciencia que se basa en la observación, particularmente en observaciones en las que hay una componente importante de incertidumbre. En este contexto, la aproximación cuantitativa a la Química se basa en gran parte en la descripción de esas observaciones y en las conclusiones que se pueden inferir a partir de ellas y la Estadística proporciona herramientas que permiten llevar a cabo esas tareas. Por ello, es necesario que el alumno conozca algunas herramientas estadísticas sencillas para realizar y comprender un análisis de datos y también la existencia de metodología estadística más potente que puede ser aplicada para resolver muchos problemas en el campo de la Química.

Al superar la asignatura, el estudiante será más competente para...

- 1:** Recabar, analizar y sintetizar información de manera crítica.
- 2:** Trabajar en grupo, identificando objetivos y responsabilidades individuales y colectivas y actuando de forma adecuada en cada situación.
- 3:** Identificar objetivos para el desarrollo personal, académico y profesional y trabajar para conseguirlo.
- 4:** Poseer un método de estudio y trabajo adaptable y flexible.
- 5:** Conocer adecuadamente la naturaleza de los sistemas informáticos y de las herramientas estadísticas, y capacidad para utilizarlos de modo eficiente.
- 6:** Comprender la necesidad y utilidad de la Informática y la Estadística, como herramientas, en el ejercicio profesional.
- 7:** Conocer los parámetros característicos de los ordenadores para poder comparar sus prestaciones.
- 8:** Utilizar hojas de cálculo y, si es necesario, desarrollar programas, para resolver problemas de tratamiento de información.
- 9:** Poder importar/exportar información entre distintas herramientas informáticas.
- 10:** Abordar el autoaprendizaje para adaptarse a la evolución de las herramientas informáticas específicas de su entorno profesional.
- 11:** Conocer y diferenciar los distintos tipos de datos para poder identificar las técnicas estadísticas más adecuadas.
- 12:** Resumir la información de un conjunto de datos mediante herramientas descriptivas e interpretarla.

- 13:** Resolver problemas sencillos de cálculo de probabilidades e interpretar los resultados.
- 14:**
Conocer la base probabilística de la Inferencia Estadística.
- 15:**
Distinguir de forma clara entre los procedimientos inferenciales y descriptivos.
- 16:**
Interpretar y utilizar la estimación puntual y por intervalos y las pruebas de hipótesis en diversos problemas químicos.
- 17:**
Valorar la importancia de los conceptos de inferencia estadística en la toma de decisiones.
- 18:**
Conocer aspectos esenciales de los modelos de regresión y de análisis de la varianza, y sus aplicaciones en Químiometría.
- 19:**
Utilizar un programa estadístico para el análisis de datos químicos, interpretar los resultados y elaborar informes.

Importancia de los resultados de aprendizaje que se obtienen en la asignatura:

- Por un lado, capacitan al alumno para hacer un uso eficiente del ordenador y de las herramientas informáticas actuales para ordenadores personales, dándole seguridad en el uso avanzado de las tecnologías de la información y su aplicación en el ejercicio de la profesión.
- Por otro lado, proporcionan el conocimiento básico de los conceptos y técnicas estadísticas necesario para leer e interpretar estudios y publicaciones en el campo de la Química basados en análisis estadísticos. Además, la asignatura proporciona una base sólida para realizar análisis de datos sencillos, que pueden ayudar en la toma de decisiones siguiendo los aspectos metodológicos de la investigación científica.

Evaluación

Actividades de evaluación

El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos mediante las siguientes actividades de evaluación

1: Evaluación y valoración de la parte de Informática

El alumno será evaluado de forma global en cada una de las dos convocatorias a las que tiene derecho y en las fechas asignadas. La prueba constará de las siguientes dos partes:

Parte I: Prueba escrita, de 1 hora de duración, en la que se recojan cuestiones teórico-prácticas y de tipo test de la Actividad 1. La puntuación NI1 toma, como máximo, un valor de 10 puntos y tiene un peso del 30% en la nota.

Parte II: Prueba en sala de ordenadores, de 2 horas de duración, en la que se resuelvan, a través de casos prácticos, cuestiones de la Actividad 2. La puntuación NI2 toma, como máximo, un valor de 10 puntos y tiene un peso del 70% en la nota.

No se permite la utilización de apuntes en ninguna de las dos partes.

La nota final cuantitativa de la parte de Informática es $NI=(0,3*NI1+0,7*NI2)$.

Con carácter **liberatorio** para las dos convocatorias del curso académico, el alumno puede optar por sustituir

la evaluación de las Actividades 1 o 2 en el examen global, por pruebas parciales al finalizar dichas actividades (cuyas fechas serán fijadas con precisión). La prueba parcial de la Actividad 1 consiste en una prueba escrita con cuestiones teórico-prácticas y de tipo test. La prueba parcial de la Actividad 2 consiste en la entrega de un cuaderno de trabajo con soluciones a problemas y cuestiones planteados durante el periodo de la actividad (con un peso del 20%) y en la realización de una prueba individual, que incluye la resolución de casos prácticos relacionados con la Actividad 2 (con un peso del 80%).

2: Evaluación y valoración de la parte de Estadística

El alumno será evaluado de forma global en cada una de las dos convocatorias a las que tiene derecho y en las fechas asignadas. La prueba constará de las siguientes dos partes:

Parte I: Prueba escrita, de 1 hora de duración, en el que se recojan cuestiones teórico-prácticas y de tipo test de las Actividades 3, 4 y 5. La puntuación NE1 toma, como máximo, un valor de 30 puntos (hasta 10 por cada una de las 3 actividades).

Parte II: Prueba escrita, de 2 horas de duración, en el que se resuelvan en un caso práctico, cuestiones de las Actividades 3, 4 y 5 mediante el uso del programa estadístico R Commander. La puntuación NE2 toma, como máximo, un valor de 30 puntos (hasta 10 por cada una de las 3 actividades).

Se permite la utilización de apuntes en ambas partes.

La nota final cuantitativa de la parte de Estadística es: $NE = (NE1 + NE2) / 6$.

Con carácter **liberatorio** para las dos convocatorias del curso académico, el alumno puede optar por sustituir la evaluación de las actividades 3 o 4 en el examen global (tanto en la Parte I como en la Parte II) por sendas pruebas parciales al finalizar dichas actividades (cuyas fechas serán fijadas con precisión). Tales pruebas parciales consisten en la entrega de un cuaderno de trabajo con soluciones a problemas y cuestiones planteados durante el periodo de cada una de las actividades (y puntuado hasta 10 puntos por cada entrega) y en la realización de una prueba, que incluye la resolución de un caso práctico mediante el uso de R Commander (también con puntuación máxima de 10 puntos por prueba).

3: Valoración de la asignatura

La nota final cuantitativa de la asignatura es $NF = (NI + NE) / 2$, siempre que ambas partes tengan simultáneamente una puntuación ≥ 5 (es decir, ambas aprobadas) o una puntuación < 5 (es decir, ambas suspensas). En el resto de los casos la asignatura no se considerará aprobada, la nota final cuantitativa será $NF = \min((NI + NE) / 2, 4)$ y se guardará la parte que esté aprobada para la segunda convocatoria del curso.

4:

El número de convocatorias oficiales de examen a las que la matrícula da derecho (2 por matrícula) así como el consumo de dichas convocatorias se ajustará a la Normativa de Permanencia en Estudios de Grado (http://www.unizar.es/sg/doc/BOUZ10-10_001.pdf) y Reglamento de Normas de Evaluación del Aprendizaje. A este último reglamento, también se ajustará el sistema de calificación, y de acuerdo a la misma se hará público el horario, lugar y fecha en que se celebrará la revisión al publicar las calificaciones. Dicha normativa puede consultarse en:

<http://wzar.unizar.es/servicios/coord/norma/evalu/evalu.html>

Actividades y recursos

Presentación metodológica general

El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en lo siguiente:

- Breve descripción de conceptos y desarrollo de casos prácticos con datos químicos (25 horas).
- Clases en laboratorio informático en grupos reducidos (35 horas). Resolución de problemas y análisis de datos.

- Trabajo personal (90 horas). A partir del resto de actividades indicadas, el estudiante debe responsabilizarse en la creación y consolidación de un programa de trabajo estructurado. El trabajo personal incluye el estudio individual, la preparación individual de trabajos y sesiones de trabajo en tutorías.

Proponemos un aprendizaje no memorístico basado en la reflexión crítica de los conceptos. Para conseguir estos objetivos se utiliza el aprendizaje basado en casos con datos químicos. Estos procesos de aprendizaje pretenden el estímulo de la iniciativa y creatividad personal, el manejo de fuentes documentales, la reflexión sobre aspectos teóricos previamente aprendidos, y la estructuración de un discurso lógico que vaya del planteamiento de un problema hasta la conclusión del mismo.

Los guiones y conjuntos de datos de las sesiones prácticas y cualquier otro material que se considere conveniente, estarán accesibles en la plataforma MOODLE (<http://moodle.unizar.es>).

Actividades de aprendizaje programadas (Se incluye programa)

El programa que se ofrece al estudiante para ayudarle a lograr los resultados previstos comprende las siguientes actividades...

1:

Actividad 1: Adquisición de conocimientos básicos de Informática.

Metodología: Clases magistrales participativas en grupo grande. Aprendizaje basado en casos. (1 ECTS).

Competencias:

- Conocimiento adecuado de la naturaleza de los sistemas informáticos y capacidad para utilizarlos de modo eficiente.
- Comprender la necesidad y utilidad de la Informática, como herramienta, en el ejercicio profesional.
- Conocer los parámetros característicos de los ordenadores para poder comparar sus prestaciones.

Temario:

- Introducción a la Informática. Aplicaciones de la Informática
- Hardware y software. Sistemas operativos. Redes de ordenadores. Lenguajes de programación.

2:

Actividad 2: Resolución de problemas utilizando herramientas de software.

Metodología: Aprendizaje basado en casos. Clases en laboratorio informático. Trabajo en equipo e individual. (2 ECTS).

Competencias:

- Conocimiento adecuado de la naturaleza de los sistemas informáticos y capacidad para utilizarlos de modo eficiente.
- Ser capaz de utilizar hojas de cálculo y, si es necesario, desarrollar programas, para resolver problemas de tratamiento de información.
- Ser capaz de importar/exportar información entre distintas herramientas informáticas.
- Poseer capacidad de autoaprendizaje para adaptarse a la evolución de las herramientas informáticas específicas de su entorno profesional.

Temario:

- Hojas de cálculo. Gestión de datos. Búsqueda de objetivos.
- Programación estructurada y modular. Estructuras de datos y de control. Procedimientos y funciones.

3: Actividad 3: Análisis exploratorio de datos y conceptos básicos de cálculo de probabilidades.

Metodología: Breve descripción de conceptos y desarrollo de casos prácticos con datos químicos. Clases en laboratorio informático. Trabajo no presencial. (1 ECTS).

Competencias:

- Conocer y diferenciar los distintos tipos de datos.
- Identificar las técnicas aplicables a cada tipo de datos.
- Resumir, de forma numérica y gráfica, la información de un conjunto de datos.
- Analizar la relación existente entre dos variables.
- Efectuar análisis exploratorios de datos con un programa estadístico (R Commander).
- Interpretar los resultados de un análisis y elaborar un informe.
- Conocer algunos tipos básicos de variables aleatorias y sus características.
- Resolver problemas sencillos de cálculo de probabilidades e interpretar los resultados.

Temario:

- Introducción a la Estadística y conceptos fundamentales. Utilidad de la Estadística en Química.
- Tipos de datos.
- Análisis exploratorio, unidimensional y bidimensional, de datos.
- Conceptos básicos de probabilidad y variables aleatorias más usuales.

4: Actividad 4: Inferencia estadística.

Metodología: Breve descripción de conceptos y desarrollo de casos prácticos con datos químicos. Clases en laboratorio informático. Trabajo no presencial. (1 ECTS).

Competencias:

- Distinguir entre población y muestra.
- Distinguir entre estadística descriptiva y estadística inferencial.
- Estimar parámetros desconocidos de una población a partir de la información muestral.
- Utilizar e interpretar la estimación por intervalos de confianza.
- Plantear e interpretar los contrastes de hipótesis y su uso en la toma de decisiones.
- Leer de forma crítica y comprender un análisis inferencial de un conjunto de datos químicos.
- Elaborar informes.

Temario:

- Introducción a la inferencia estadística.
- Estimación puntual de un parámetro.
- Estimación por intervalos de confianza.
- Contrastos de hipótesis.
- Inferencia estadística no paramétrica.

5: Actividad 5: Modelos lineales.

Metodología: Breve descripción de conceptos y desarrollo de casos prácticos con datos químicos. Clases en laboratorio informático. Trabajo no presencial. (1 ECTS).

Competencias:

- Conocer algunos aspectos básicos de los modelos de regresión y correlación.
- Conocer algunos aspectos básicos del diseño de experimentos y de los modelos ANOVA.

Temario:

- Regresión lineal simple. Calibración en análisis instrumental.
- Introducción al diseño de experimentos. Modelo ANOVA unifactorial.

Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

La asignatura consta de 25 clases teóricas y 35 horas de prácticas de ordenador en grupos reducidos.

Las clases teóricas se distribuyen en el periodo oficial recogido en la página web de la Facultad de Ciencias (<http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>)

La distribución de las sesiones prácticas se puede consultar en la plataforma MOODLE.

Fin de la actividad 1: posibilidad de realización de una prueba individual.

Fin de la actividad 2: posibilidad de presentación del primer cuaderno de trabajo y realización de una prueba individual.

Fin de la actividad 3: posibilidad de presentación del segundo cuaderno de trabajo y realización de una prueba individual.

Fin de la actividad 4: posibilidad de presentación del tercer cuaderno de trabajo y realización de una prueba individual.

El calendario de las pruebas globales puede consultarse en la página web de la Facultad de Ciencias (<http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>) o la página MOODLE de la asignatura.

Bibliografía

La bibliografía recomendada es la siguiente:

1:

Título: Introducción a la Informática (4^a edición). Autores: A. Prieto, A. Lloris, J. C. Torres. Editorial: Mc Graw-Hill 2006.

2:

Título: Excel : aplicaciones científicas y de ingeniería. Autores: David M. Bourg. Editorial: Anaya 2007.

3:

Título: Estadística y Quimiometría para Química Analítica (4^a edición). Autores: J. N. Miller y J. C. Miller. Editorial: Prentice Hall (Pearson) 2002.

4:

Título: Fundamentos de Estadística. Autores: D. Peña. Editorial: Alianza Editorial 2001.

5:

Título: Regresión y diseño de experimentos. Autores. D. Peña. Editorial: Alianza Editorial 2002.

6:

<http://knuth.uca.es/> (acceso al proyecto R de la Universidad de Cádiz, en el que se pueden encontrar libros y software libres).

Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada

- Bourg, David M.. Excel : aplicaciones científicas y de ingeniería / David M. Bourg Madrid : Anaya, cop. 2007
- Miller, James N.. Estadística y Quimiometría para química analítica / James N. Miller, Jane C. Miller ; traducción, Carlos Maté Jiménez, Roberto Izquierdo Hornillos . - 1a ed. en español Madrid : Prentice Hall, 2002
- Peña Sánchez de Rivera, Daniel. Fundamentos de estadística / Daniel Peña . - 1^a ed., 1^a reimp. Madrid : Alianza, 2005
- Peña Sánchez de Rivera, Daniel. Regresión y diseño de experimentos / Daniel Peña Madrid : Alianza Editorial, 2002
- Prieto Espinosa, Alberto. Introducción a la informática / Alberto Prieto Espinosa, Antonio Lloris Ruiz, Juan Carlos Torres Cantero . - 4^a ed. Madrid [etc.] : MacGraw-Hill, D.L. 2006