

60626 - Quimiometría

Información del Plan Docente

Año académico	2016/17
Centro académico	100 - Facultad de Ciencias
Titulación	542 - Máster Universitario en Investigación Química
Créditos	3.0
Curso	1
Periodo de impartición	Primer Semestre
Clase de asignatura	Optativa
Módulo	---

1. Información Básica

1.1. Recomendaciones para cursar esta asignatura

No hay recomendaciones específicas para esta asignatura.

1.2. Actividades y fechas clave de la asignatura

Las fechas concretas en que tendrán lugar la entrega de trabajos a lo largo del curso se comunicarán a los estudiantes con suficiente antelación.

Las pruebas de evaluación global tendrán lugar en las fechas que se determinan en el calendario de la Facultad de Ciencias (consultar el tablón de anuncios o la página web

<http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do>)

2. Inicio

2.1. Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

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

Diseña y ejecuta experimentos de manera autónoma y consistente dirigidos a la obtención y evaluación de los parámetros de calidad básicos de los métodos y resultados analíticos (precisión, exactitud, incertidumbre).

Utiliza los principales procedimientos de diseño experimental y de optimización.

Aplica e interpreta los métodos básicos de reconocimiento de pautas.

Reconoce las posibilidades de los métodos de calibración múltiple y multivariante.

Utiliza y maneja aplicaciones informáticas que desarrollan las técnicas quimiométricas del curso.

2.2.Introducción

Breve presentación de la asignatura

La Quimiometría constituye una disciplina de la química que utiliza herramientas y conceptos procedentes de la metrología física, la matemática aplicada, el diseño experimental, la estadística y la informática con diversos fines relacionados con la obtención y manejo de información numérica de naturaleza química de manera correcta y óptima. En la presente asignatura priorizaremos de manera especial los siguientes fines: la caracterización de la incertidumbre del resultado de las medidas experimentales (químicas) y su adecuación a requisitos externos; el diseño de experimentos eficientes para optimizar métodos analíticos u otros procesos; y el uso de estrategias de naturaleza multivariada tanto para la interpretación de sets de datos complejos -identificación de patrones- como para la realización de calibraciones multivariantes.

La asignatura se plantea de una manera práctica, siempre empleando una estrategia basada en el estudio y resolución de casos prácticos. A pesar de su carácter Optativo, la asignatura contiene elementos de gran importancia para la formación de cualquier investigador que se vaya a encontrar con datos químicos de carácter numérico.

3.Contexto y competencias

3.1.Objetivos

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

- 1.- El alumno será capaz de diseñar experimentos para evaluar la incertidumbre de las medidas experimentales y para que la incertidumbre del resultado sea la adecuada para un determinado requisito externo
- 2.- El alumno conocerá y será capaz de aplicar las estrategias de optimización experimental más relevantes en química analítica
- 3.- Conocerá el fundamento y será capaz de manejar las estrategias de análisis multivariado más adecuadas para el tratamiento de los datos químicos
- 4.- Será capaz de diseñar, ejecutar y evaluar procesos de calibración multivariante

3.2.Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

En el marco del Máster en investigación química esta asignatura del área de Química Analítica pretende aportar los conceptos y herramientas necesarios tanto para el trabajo cotidiano con datos numéricos de naturaleza química, como para diseñar de manera resuelta procesos experimentales complejos necesarios para cualquier investigación relacionada con el uso y obtención de datos numéricos de naturaleza química.

3.3.Competencias

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

Evaluar la calidad de las medidas de naturaleza química y adaptar el método para que la incertidumbre de la medida sea consistente con requisitos externos

Diseñar y ejecutar experimentos para evaluar el efecto de los factores a estudio y aislar las fuentes de incertidumbre de un proceso de medición

60626 - Quimiometría

Realizar planes experimentales dirigidos a optimizar sistemas de medida y a verificar los efectos de los factores a estudio

Analizar sets de datos complejos empleando estrategias de análisis multivariada

Diseñar, implementar y evaluar sistemas de calibración multivariante

3.4.Importancia de los resultados de aprendizaje

Los resultados del aprendizaje obtenido en la asignatura son esenciales para todo estudiante que necesite manipular sets de datos cuantitativos, que haya de proporcionar resultados analíticos con estimación de su calidad, que haya de tomar decisiones racionales en base a dichos datos o que necesite desarrollar métodos de análisis.

En este sentido, los resultados complementan los obtenidos en las otras asignaturas del Máster, y permiten al estudiante disponer de una visión general y completa de los principales métodos quimiométricos utilizados actualmente y de su aplicación a diferentes sistemas objetos de estudio.

4.Evaluación

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

Evaluación continua del proceso de aprendizaje del estudiante mediante la resolución de casos a lo largo del curso, que serán realizados y expuestos como trabajos académicos.

La calificación final será el promedio de las actividades examinadas, que deberán haber sido superadas.

En los periodos de evaluación global el estudiante será evaluado de todas aquellas actividades que no haya superado satisfactoriamente a lo largo del curso.

Según normativa de evaluación, el estudiante que no opte por la evaluación continua o que no supere la asignatura por este procedimiento o que quisiera mejorar su calificación, tendrá derecho a presentarse a la prueba global, prevaleciendo, en cualquier caso, la mejor de las calificaciones obtenidas.

El número de convocatorias oficiales de examen a las que la matrícula da derecho, así como el sistema de evaluación y calificación se ajustarán a la normativa vigente en la Universidad de Zaragoza.

http://wzar.unizar.es/servicios/maste/docum/rto_%20permanencia14.pdf

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

5.Actividades y recursos

5.1.Presentación metodológica general

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

Desarrollo de sesiones de teoría y resolución de casos prácticos en los que se fomentará la participación e iniciativa del alumno. Para ello se utilizará:

60626 - Quimiometría

1.- Exposición en clases magistrales: para ofrecer una visión de un problema tipo y su resolución aplicando herramientas quimiométricas

2.- Resolución práctica de casos. Implica la selección y discusión de la metodología quimiométrica junto con la justificación-interpretación de resultados

3.-Selección de casos a propuesta de los alumnos. Supervisión y seguimiento de la autonomía y pro-actividad del alumno

5.2.Actividades de aprendizaje

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

ACTIVIDADES FORMATIVAS

Actividad formativa 1 : clases magistrales. Exposición de casos y principios de los procedimientos para estudiarlos

Número de Horas: 10 % Presencialidad: 100

Actividad formativa 2 : casos prácticos del profesor. Discusión y puesta en común de la resolución de los casos prácticos planteados

Número de Horas: 10 % Presencialidad: 100

Actividad formativa 3 : casos prácticos del alumno. Propuesta, a iniciativa del alumno, de casos prácticos, con su resolución, supervisión del profesor y discusión grupal de resultados

Número de Horas: 10

5.3.Programa

MODULO I: Estrategias de medición y aislamiento de incertidumbre analítica

Precisión del método e incertidumbre del resultado. Incertidumbre en el caso de la distribución normal. Propagación de incertidumbres. Tolerancias. Estimación de la incertidumbre a partir del modelado de la función de medición. Aislamiento experimental de fuentes de incertidumbre. Cálculo experimental de la incertidumbre

MODULO II: Diseño y optimización de experimentos

Introducción al Diseño de Experimentos. Diseños Factoriales de dos y tres niveles. Diseños factoriales fraccionados. Estrategias de optimización. Métodos robustos de optimización

MODULO III: Reconocimiento de la información

60626 - Quimiometría

Modelos no supervisados: Análisis de Componentes Principales (PCA). Estudio de variables latentes e interpretación de los sistemas. Modelos supervisados

MODULO IV: Calibración múltiple y multivariante

Modelos de calibración y regresión múltiple y multivariante. Regresión lineal múltiple (MLR). Regresión mediante Componentes Principales (PCR). Regresión de Mínimos Cuadrados Parciales (PLS).

5.4. Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

Las fechas e hitos clave de la asignatura están descritos con detalle en la página Web de la Facultad de Ciencias:

<http://ciencias.unizar.es/web/horarios.do> .

En cualquier caso, la información detallada se proporcionará en clase y se publicará con antelación suficiente en el tablón de anuncios del Departamento.

5.5. Bibliografía y recursos recomendados

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

1. MILLER J.N., J.C.. *Estadística y Quimiometría para Química Analítica* . 4ª Edición. Prentice Hall, Madrid, 2002
2. BLANCO M., CERDA V. Editores. *Temas avanzados de Quimiometría* . Universidad de las Islas Baleares, Palma, 2007
3. VANDEGINSTE B.G.M., MASSART D.L., BUYDENS L.M.C., DE JONG S., LEWI P.J., SMEYERS-VERBEKE J . *Handbook of chemometrics and qualimetrics: part A and B* . Elsevier. Amsterdam, 1997
4. BRERETON R.G. *Chemometrics. Data analysis for the laboratory and chemical plant* . Wiley, Chichester, 2003
5. MARTENS H. & NAES T.; *Multivariate Calibration*. Wiley, Chichester April 1991