

## ASIGNATURA: QUIMIOMETRIA

**MATERIA:** Estadística y Experimentación

**MÓDULO:** Módulo Tecnológico

**ESTUDIOS:** Máster en Química Analítica

Página 1 de 6

### CARACTERÍSTICAS GENERALES\*

**Tipo:**  Formación básica,  Obligatoria,  Optativa

Trabajo de fin de grado,  Prácticas externas

**Duración:** Semestral

**Semestre/s:** 1

**Número de créditos ECTS:** 5

**Idioma/s:** Castellano, Catalán, Inglés

### DESCRIPCIÓN

**BREVE DESCRIPCIÓN Y JUSTIFICACIÓN** (del sentido de la asignatura en relación a los estudios. Entre 100 y 200 palabras.) Quimiometria es la ciencia de extraer información de sistemas químicos mediante tratamiento de los datos que proporcionan; estos tratamientos utilizan técnicas matemáticas y estadísticas, tanto para el diseño de los experimentos que darán origen a los datos, como para su proceso con el objetivo de obtener información. Una de las áreas donde la Quimiometría tiene especial aplicación es en la Química Analítica, dada la cantidad de datos que se generan.

**COMPETENCIAS** (de la asignatura puestas en relación con las competencias preasignadas en la materia.)

#### **Competencias Básicas**

CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el 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

#### **Específicas**

E7. Poseer conocimientos avanzados de técnicas estadísticas, diseño de experiencias y optimización de procesos para el diseño y desarrollo de métodos de análisis.

\* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: QUIMIOMETRIA

**MATERIA:** Estadística y Experimentación

**MÓDULO:** Módulo Tecnológico

**ESTUDIOS:** Máster en Química Analítica

Página 2 de 6

E8. Capacidad para interpretar los resultados obtenidos al aplicar técnicas estadísticas, de diseño de experiencias y de optimización de procesos a datos experimentales obtenidos en un laboratorio de química analítica.

### **Competencias Generales**

CG2. Capacidad para realizar una práctica responsable de la profesión

### **Competencias Transversales**

T3. Capacidad para valorar el impacto del uso de la química en el desarrollo sostenible de la sociedad

**REQUISITOS PREVIOS\*** (módulos, materias, asignaturas o conocimientos necesarios para el seguimiento de la asignatura. Pueden hacerse constar asignaturas que deben haberse cursado.)

Los alumnos que hayan accedido al máster desde titulaciones de grado o licenciatura en química no precisaran ningún complemento adicional de formación. Para las demás titulaciones, deberán haber cursado previamente materias que incluyan contenidos básicos de química analítica instrumental y de elucidación estructural (incluida la espectrometría de masas) y estadística.

**CONTENIDOS** (como relación de los apartados que constituyen el temario de la misma, hasta un detalle de segundo nivel.)

1. Evolución histórica de la Quimiometría y sus aplicaciones en Química Analítica.
2. Tratamiento de datos en los laboratorios de análisis
  - a. Comparación y transferencia de métodos
  - b. Precisión intermedia
  - c. Linealidad
  - d. Gráficos de control y análisis de tendencias
  - e. Análisis de datos de origen sensorial
3. Diseño y optimización de métodos
  - a. Diseños experimentales
  - b. Métodos de optimización secuencial
  - c. Ajuste de superficies de respuesta.
4. Análisis Multivariante:
  - a. Cluster analysis
  - b. Análisis de Componentes principales. Regresión
  - c. Mínimos cuadrados parciales.

\* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: QUIMIOMETRIA

**MATERIA:** Estadística y Experimentación  
**MÓDULO:** Módulo Tecnológico  
**ESTUDIOS:** Máster en Química Analítica

Página 3 de 6

### METODOLOGÍA

**ACTIVIDADES FORMATIVAS\*** (Completar la tabla relacionando actividades, carga de trabajo, en créditos ECTS, y competencias.)

Actividades formativas	Horas /Créditos ECTS	Competencias
Sesiones de exposición de conceptos	25 / 0,93	E7, E8, T3, CG2
Sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos	9 / 0,33	E7, E8, T3, CG2
Seminarios	3 / 0,11	
Actividades obligatorias despacho profesor	-	
Trabajo práctico / laboratorio	-	
Presentaciones	4 / 0,15	E7, E8, T3, CG2
Actividades de estudio personal por parte de los estudiantes	90 / 3,33	E7, E8
Actividades de evaluación (exámenes, controles de seguimiento...)	4 / 0,15	E7, E8
<b>TOTAL</b>	<b>135 / 5</b>	

**EXPLICACIÓN DE LA METODOLOGÍA DIDÁCTICA** (justificando los métodos didácticos usados en relación a las competencias y los contenidos de la asignatura. Entre 100 y 200 palabras.)

- MD1. Exposición de contenidos mediante presentación o explicación (posiblemente incluyendo demostraciones) por parte de un profesor.
- MD2. Resolución de ejercicios, planteamiento/resolución de problemas y exposición/discusión de casos por parte de un profesor con la participación activa de los estudiantes.
- MD3. Instrucción realizada por un profesor con el objetivo de revisar, discutir y resolver dudas sobre los materiales y temas presentados en las sesiones de exposición de conceptos y sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos.
- MD4. Realización de actividades de laboratorio o similar (prácticas con ordenador, proyectos, talleres, etc.) por parte del estudiante, bajo la supervisión directa de un profesor.
- MD5. Presentación oral a un profesor y posiblemente a otros estudiantes por parte de un estudiante. Puede ser un trabajo preparado por el estudiante mediante búsquedas en la bibliografía publicada o un resumen de un trabajo práctico o proyecto acometido por dicho estudiante.
- MD6. Trabajo personal del estudiante necesario para adquirir las competencias de cada Materia y asimilar los conocimientos expuestos en las sesiones de exposición

\* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: QUIMIOMETRIA

**MATERIA:** Estadística y Experimentación

**MÓDULO:** Módulo Tecnológico

**ESTUDIOS:** Máster en Química Analítica

Página 4 de 6

de conceptos y sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos, utilizando, cuando sea necesario, el material recomendado de consulta.

- MD7. Pruebas orales y/o escritas realizadas durante el periodo lectivo de una asignatura o una vez finalizada la misma.

### EVALUACIÓN

**MÉTODOS DE EVALUACIÓN\*** (Completar la tabla relacionando métodos de evaluación, competencias y peso en la calificación de la asignatura.)

Métodos de evaluación	Peso	Competencias
Examen final	30%	E5, E6, T3, CG2
Examen/es parcial/es	-	E5, E6, T3, CG2
Actividades de seguimiento	40%	E5, E6, T3, CG2
Trabajos y presentaciones	20%	
Trabajo experimental o de campo	-	
Proyectos	-	
Valoración de la empresa o institución	-	
Participación	10%	E5, E6, T3, CG2

**RESULTADOS DE APRENDIZAJE** (Explicación de las realizaciones del alumno que permiten la evaluación de competencias, relacionándolos con las competencias y los métodos de evaluación.)

- El estudiante debe demostrar su conocimiento en la aplicación de las técnicas estadísticas en el ámbito de la Química Analítica. (E7, E8)
- El estudiante debe demostrar su conocimiento para diseñar el programa de experiencias que permita extraer la máxima información con el mínimo número de experimentos dependiendo de la problemática concreta. (E7, E8)
- El estudiante debe demostrar suficiente sentido estadístico para analizar e interpretar los resultados obtenidos de una serie de experiencias y diseñar pruebas complementarias en caso de ser necesario. (E7, E8)
- El estudiante debe demostrar conocimientos suficientes y habilidad para optimizar un procedimiento analítico y caracterizarlo mediante la definición de los parámetros adecuados. (E7, E8)
- El estudiante debe demostrar el conocimiento de las repercusiones derivadas del uso incorrecto de las técnicas estadísticas y de los resultados obtenidos. (CG2, T3)

**CALIFICACIÓN** (Explicación del sistema de cómputo de la calificación de la asignatura.)

\* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: QUIMIOMETRIA

**MATERIA:** Estadística y Experimentación

**MÓDULO:** Módulo Tecnológico

**ESTUDIOS:** Máster en Química Analítica

Página 5 de 6

La evaluación de la asignatura y la nota final asociada depende de la convocatoria.

**Para la primera convocatoria** se consideran las siguientes situaciones:

Si ha obtenido la escolaridad,

Si se presenta al **examen final** obteniendo una nota F, se calcula la nota NC según  $NC = (0,40*A + 0,30*P + 0,30*F)*10$ ; si se cumple que  $(A \text{ y } P \text{ y } F) \geq 3,0$  la nota de la primera convocatoria (NPC) será  $NPC = NC$ , de lo contrario, la nota será  $NPC = \min(A, P \text{ y } F)$  (suspendido).

Si no ha obtenido la escolaridad, la nota de la primera convocatoria será "No presentado por falta de escolaridad"

**Para la segunda convocatoria**, se considerarán las siguientes situaciones

Si ha obtenido la escolaridad y se presenta al **examen** obteniendo una nota S, se considera a también la nota de las actividades (A) y se calcula la nota NC según  $NC = (0,40*A + 0,60*S)*10$ ; la nota de la segunda convocatoria (NSC) será  $NSC = NC$

Si no ha obtenido la escolaridad, la nota de la segunda convocatoria será "No presentado por falta de escolaridad"

En las **convocatorias posteriores**, la nota de la convocatoria será la del examen correspondiente.

**EVALUACIÓN DE LAS COMPETENCIAS** (Definir expresiones de cálculo para cada competencia en función de las actividades de evaluación correspondientes.)

La calificación de las competencias será la misma que la calificación del examen final.

### BIBLIOGRAFÍA (recomendada y accesible al alumno.)

Básica:

- Miller, J. N., & Miller, J. C. (2010). Statistics and chemometrics for analytical chemistry. 6/E Pearson Education. (<http://www.pearsoned.co.uk/miller>)
- Miller, J. N., & Miller, J. C. (2002). Estadística y quimiometría para química analítica. 4/E

Complementaria:

- Mullins, E. (2003). Statistics for the quality control chemistry laboratory. Royal Society of Chemistry.
- Vandeginste, B. G. M., Deming, S. N., Michotte, & Kaufman, L. (1988). Chemometrics: a textbook.

\* Estas características no deben ser modificadas sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: QUIMIOMETRIA

**MATERIA:** Estadística y Experimentación

**MÓDULO:** Módulo Tecnológico

**ESTUDIOS:** Máster en Química Analítica

Página 6 de 6

- Brereton. R. G. (2003) Chemometrics. Data analysis for the laboratory and chemical plant. Wiley

### HISTÓRICO DEL DOCUMENTO

**MODIFICACIONES ANTERIORES** (Indicar fecha y autor/es, las más recientes primero)

28/02/2015 Lucinio González Sabaté

01/09/2014 Lucinio González Sabaté

**ÚLTIMA REVISIÓN** (Indicar fecha y autor/es.)

29/09/2016 Lucinio González Sabaté