

# **Escuela de Doctorado y Estudios de Posgrado**

## **Máster Universitario en Química**

### **GUÍA DOCENTE DE LA ASIGNATURA (ESCENARIO 1):**

#### **Diseño de experimentos y análisis de datos (2021 - 2022)**

## 1. Datos descriptivos de la asignatura

Asignatura: <b>Diseño de experimentos y análisis de datos</b>	Código: <b>835931102</b>
<ul style="list-style-type: none"><li>- Centro: <b>Escuela de Doctorado y Estudios de Postgrado</b></li><li>- Lugar de impartición: <b>Facultad de Ciencias. Sección de Química</b></li><li>- Titulación: <b>Máster Universitario en Química</b></li><li>- Plan de Estudios: <b>2018 (Publicado en 2014-04-29)</b></li><li>- Rama de conocimiento: <b>Ciencias</b></li><li>- Itinerario / Intensificación:</li><li>- Departamento/s: <b>Química</b></li><li>- Área/s de conocimiento: <b>Química Analítica</b></li><li>- Curso: <b>1</b></li><li>- Carácter: <b>Obligatoria</b></li><li>- Duración: <b>Primer cuatrimestre</b></li><li>- Créditos ECTS: <b>3,0</b></li><li>- Modalidad de impartición: <b>Presencial</b></li><li>- Horario: <b>Enlace al horario</b></li><li>- Dirección web de la asignatura: <b><a href="http://www.campusvirtual.ull.es">http://www.campusvirtual.ull.es</a></b></li><li>- Idioma: <b>Castellano e Inglés (0,15 ECTS en Inglés)</b></li></ul>	

## 2. Requisitos para cursar la asignatura

Ninguno

## 3. Profesorado que imparte la asignatura

Profesor/a Coordinador/a: <b>ANA ISABEL JIMENEZ ABIZANDA</b>
- Grupo: <b>Único</b>
<b>General</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- Nombre: <b>ANA ISABEL</b></li><li>- Apellido: <b>JIMENEZ ABIZANDA</b></li><li>- Departamento: <b>Química</b></li><li>- Área de conocimiento: <b>Química Analítica</b></li></ul>

#### Contacto

- Teléfono 1: **922318040**
- Teléfono 2:
- Correo electrónico: **aijimene@ull.es**
- Correo alternativo:
- Web: **<http://www.campusvirtual.ull.es>**

#### Tutorías primer cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Lunes	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	nº 8, 2ª Planta
Todo el cuatrimestre		Martes	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	nº 8, 2ª Planta
Todo el cuatrimestre		Jueves	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	nº 8, 2ª Planta

Observaciones: Se podrá asistir a tutorías fuera de este horario previo acuerdo con la profesora.

#### Tutorías segundo cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Lunes	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	nº 8, 2ª Planta
Todo el cuatrimestre		Martes	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	nº 8, 2ª Planta
Todo el cuatrimestre		Jueves	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	nº 8, 2ª Planta

Observaciones: Se podrá asistir a tutorías fuera de este horario previo acuerdo con la profesora.

#### 4. Contextualización de la asignatura en el plan de estudio

Bloque formativo al que pertenece la asignatura: **General**  
 Perfil profesional:

#### 5. Competencias

#### Básica

**CB06** - 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

**CB07** - 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

**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

#### Específica

**CE06** - Utilizar programas informáticos que permitan plantear y resolver problemas de Química Computacional, Modelización molecular y Quimiometría

**CE07** - Aplicar las herramientas quimiométricas adecuadas a cada problema

## 6. Contenidos de la asignatura

### Contenidos teóricos y prácticos de la asignatura

#### Tema 1. Estadística descriptiva

Descriptores paramétricos y no paramétricos. Test de hipótesis.

#### Tema 2. Exploración de datos

Examen preliminar de la matriz de datos. Preprocesado. Correlaciones y distancias como medidas de la similitud. Métodos de análisis jerárquico y no jerárquico.

#### Tema 3. Análisis de Varianza

Análisis de varianza unifactorial y multifactorial. Grados de libertad y fuentes de error. ANOVA y MANOVA.

#### Tema 4. Diseño experimental

Principios básicos. Etapas. Screening Tipos de diseño: diseño por bloques y diseño factorial completo y fraccionario. Otros tipos de diseño. Interacciones.

#### Tema 5. Optimización

Principios básicos. Métodos secuenciales. Superficies de respuesta. Método de la máxima pendiente. Método Simplex. Métodos secuenciales y superficies de respuesta.

### Actividades a desarrollar en otro idioma

Gran parte de la documentación que se utilice en el aula a lo largo del curso así como algunos de los programas utilizados estarán en inglés.

## 7. Metodología y volumen de trabajo del estudiante

### Descripción

- *Clases magistrales.* Se orientan a explicar los aspectos básicos del temario con la finalidad de facilitar al alumno la comprensión y aplicación de los procedimientos específicos de la asignatura, así como a proporcionarle información actualizada y bien organizada procedente de diversas fuentes que en algunos casos pueden resultarle de difícil acceso. En las explicaciones se hará uso de los medios audiovisuales disponibles, principalmente el cañón de proyección, material impreso, etc. Asimismo, en el Aula Virtual de la asignatura se pondrán a disposición de los alumnos lecciones sobre los temas explicados para que refuercen y complementen los contenidos de los temas explicados. Al finalizar cada tema se realizará un cuestionario a través del Aula Virtual. Las clases magistrales se impartirán en el aula de informática para poder simultanearlas con las prácticas.
- *Prácticas en aula de informática (prácticas con ordenador).* Se explicará y abordará el manejo de distintos paquetes informáticos de uso frecuente en el tratamiento de datos químicos. El alumno utilizará una parte del tiempo correspondiente a las prácticas, así como su tiempo de trabajo personal, para realizar los ejercicios seleccionados por la profesora con el objetivo de profundizar en la comprensión y correcta utilización de los programas informáticos. Estos ejercicios serán entregados a través del Aula Virtual.
- *Tutorías.* Se considerarán periodos de instrucción y/o orientación realizados por el profesor con el objetivo de revisar y discutir los materiales y temas presentados en las clases, seminarios, lecturas, realización de trabajos, preparación de exposiciones, etc. Se podrán realizar en pequeños grupos o incluso de forma individualizada si las circunstancias así lo aconsejan.

### Actividades formativas en créditos ECTS, su metodología de enseñanza-aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante

Actividades formativas	Horas presenciales	Horas de trabajo autónomo	Total horas	Relación con competencias
Clases teóricas	16,00	0,00	16,0	[CB06], [CB07], [CE06], [CE07]
Clases prácticas (aula / sala de demostraciones / prácticas laboratorio)	12,00	0,00	12,0	[CB06], [CB07], [CB10], [CE06], [CE07]
Asistencia a tutorías	2,00	0,00	2,0	[CB06], [CB07], [CB10], [CE06]
Estudio autónomo	0,00	20,00	20,0	[CB06], [CB07], [CB10], [CE06], [CE07]

Preparación de seminarios, elaboración de memorias y/o informes de las prácticas realizadas, resolución de ejercicios que le haya entregado el profesor, preparación de debates, preparación de exposición oral, lecturas recomendadas, búsquedas bibliográfica	0,00	25,00	25,0	[CB06], [CB07], [CB10], [CE06], [CE07]
Total horas	30,00	45,00	75,00	
Total ECTS			3,00	

## 8. Bibliografía / Recursos

### Bibliografía Básica

Otto, M.: Chemometrics, Wiley-VCH, Alemania, 1999

Miller, J.C. y Miller, J.N.: Estadística y Quimiometría para Química Analítica, Prentice Hall, Madrid, 2002

Ramis-Ramos, G. y García Álvarez-Coque, M.C.: Quimiometría, Síntesis, Madrid, 2001

Massart, D.L., Vandeginste, B.G.M., Deming, S.N., Micote, Y. y Kauffman, L.: Chemometrics: a Textbook, Elsevier, Amsterdam, 1988

### Bibliografía Complementaria

Brown, S., Tauler, R. and Walczak, B.: Comprehensive chemometrics: chemical and biochemical data analysis, Elsevier, Amsterdam, 2009

Deming, S.: Experimental design: a chemometric approach, Oxford : Elsevier, Amsterdam , 1987

### Otros Recursos

Material disponible en el aula virtual (problemas, presentaciones, lecciones, bibliografía, etc)

## 9. Sistema de evaluación y calificación

### Descripción

La calificación de la convocatoria de enero se basará en la evaluación continua que consta de los siguientes elementos:

- Control de asistencia y participación activa en todas las actividades de la asignatura: 10%
- Evaluación de los trabajos, proyectos y ejercicios realizados a propuesta del profesorado: 40%
- Realización de cuestionarios o otras actividades (participación en foros, wiki, etc.) en aula virtual: 20%
- Evaluación del estudiante en las clases en el aula de informática: asistencia participativa, organización del trabajo, realización de ejercicios, etc.: 10%
- Evaluación de las actividades no presenciales relacionadas con las clases prácticas: memorias y/o informes de las prácticas entregados: 20%

La asistencia a las clases prácticas en el aula de informática es obligatoria, para poder aprobar la asignatura se deberán haber realizado las prácticas.

Los alumnos que no superen la evaluación continua serán evaluados en las diferentes convocatorias mediante un examen teórico-práctico sobre los contenidos de la asignatura y su calificación final será la correspondiente a dicho examen.

### Estrategia Evaluativa

Tipo de prueba	Competencias	Criterios	Ponderación
Trabajos y proyectos	[CE07], [CE06], [CB10], [CB07], [CB06]	SE2 – Evaluación continua: Evaluación de los trabajos, proyectos y ejercicios realizados a propuesta del profesorado Se valorará: <ul style="list-style-type: none"> <li>• dominio de los conocimientos teóricos y prácticos de la materia</li> <li>• cumplir los plazos de entrega</li> <li>• resultados y discusión</li> <li>• razonamiento crítico</li> <li>• capacidad de análisis y síntesis</li> <li>• capacidad de organización y planificación</li> </ul>	40,00 %

Informes memorias de prácticas	[CE07], [CE06], [CB07], [CB06]	SE8 - Evaluación de las actividades no presenciales relacionadas con las clases en aula de informática: memorias, informes de las prácticas o ejercicios resueltos entregados. Se valorará: <ul style="list-style-type: none"> <li>• ortografía y presentación</li> <li>• cumplir los plazos de entrega</li> <li>• resultados, discusión e interpretación de los resultados</li> <li>• razonamiento crítico</li> </ul> capacidad de análisis y síntesis	20,00 %
Pruebas de ejecuciones de tareas reales y/o simuladas	[CE07], [CE06]	SE4 – Evaluación continua: Realización de cuestionarios o otras actividades (participación en foros, wiki, ...) en aula virtual Se valorará: <ul style="list-style-type: none"> <li>• el dominio de los conocimientos teóricos y prácticos de la materia</li> <li>• el número de respuestas correctas en un corto espacio de tiempo</li> <li>• razonamiento crítico</li> </ul>	20,00 %
Técnicas de observación	[CE07], [CE06], [CB10], [CB07], [CB06]	SE1 – Evaluación continua: Control de asistencia y participación activa en todas las actividades de la asignatura (10%)  SE6 - Evaluación continua del estudiante en las clases en el aula de informática (10%): <ul style="list-style-type: none"> <li>• el dominio de los conocimientos teóricos y prácticos de la materia</li> <li>• participación activa</li> <li>• capacidad de organización y planificación</li> <li>• capacidad de análisis y síntesis</li> </ul>	20,00 %

## 10. Resultados de Aprendizaje

Aplicar correctamente las distintas técnicas de exploración de datos experimentales e interpretar sus resultados  
 Seleccionar y aplicar adecuadamente las diferentes técnicas de diseño experimental y optimización, identificando los factores que afectan a los mismos y utilizando la información generada para resolver problemas químicos concretos

## 11. Cronograma / calendario de la asignatura

### Descripción

La fecha en que se realizarán la prueba final contemplada en la evaluación continua de la convocatoria de junio y la evaluación única en las diferentes convocatorias se puede consultar en:

<https://www.ull.es/masteres/quimica/informacion-academica/horarios-y-calendario-de-examenes/>

La distribución de los temas por semana en el cronograma es orientativa, pudiendo sufrir cambios según las necesidades de organización docente.

### Primer cuatrimestre

Semana	Temas	Actividades de enseñanza aprendizaje	Horas de trabajo presencial	Horas de trabajo autónomo	Total
Semana 1:	Tema 1 (6 h) Tema 2 (1.5 h)	Clases de teoría Prácticas Aula de Informática Tutorías	7.50	11.25	18.75
Semana 2:	Tema 2 (4,5 h) Tema 3 (1.5 h)	Clases de teoría Prácticas Aula de Informática Tutorías	6.00	9.00	15.00
Semana 3:	Tema 3 (4.5 h)	Clases de teoría Prácticas Aula de Informática Tutorías	4.50	6.75	11.25
Semana 4:	Tema 4 (4.5 h)	Clases de teoría Prácticas Aula de Informática Tutorías	4.50	6.75	11.25
Semana 5:	Tema 4 (1.5 h) Tema 5 (6 h)	Clases de teoría Prácticas Aula de Informática Tutorías	7.50	11.25	18.75
Total			30.00	45.00	75.00