

Escuela de Doctorado y Estudios de Posgrado

Máster Universitario en Química

GUÍA DOCENTE DE LA ASIGNATURA :

**Aplicaciones del análisis multivariante en química analítica
agroalimentaria y medioambiental
(2022 - 2023)**

1. Datos descriptivos de la asignatura

Asignatura: Aplicaciones del análisis multivariante en química analítica agroalimentaria y medioambiental	Código: 835931912
<ul style="list-style-type: none">- Centro: Escuela de Doctorado y Estudios de Postgrado- Lugar de impartición: Facultad de Ciencias. Sección de Química- Titulación: Máster Universitario en Química- Plan de Estudios: 2018 (Publicado en 2014-04-29)- Rama de conocimiento: Ciencias- Itinerario / Intensificación:- Departamento/s: Química- Área/s de conocimiento: Química Analítica- Curso: 1- Carácter: Optativa- Duración: Segundo cuatrimestre- Créditos ECTS: 3,0- Modalidad de impartición: Presencial- Horario: Enlace al horario- Dirección web de la asignatura: http://www.campusvirtual.ull.es- Idioma: Castellano e Inglés (0,15 ECTS en Inglés)	

2. Requisitos para cursar la asignatura

3. Profesorado que imparte la asignatura

Profesor/a Coordinador/a: JOSE MANUEL GARCIA FRAGA
- Grupo:
General <ul style="list-style-type: none">- Nombre: JOSE MANUEL- Apellido: GARCIA FRAGA- Departamento: Química- Área de conocimiento: Química Analítica
Contacto <ul style="list-style-type: none">- Teléfono 1: 922318076- Teléfono 2:- Correo electrónico: jfraga@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	13:00	15:00	Sección de Química - AN.3F	Despacho 4 del Área de Química Analítica. 2º planta de la Sección de Química
Todo el cuatrimestre		Miércoles	13:00	15:00	Sección de Química - AN.3F	Despacho 4 del Área de Química Analítica. 2º planta de la Sección de Química
Todo el cuatrimestre		Viernes	13:00	15:00	Sección de Química - AN.3F	Despacho 4 del Área de Química Analítica. 2º planta de la Sección de Química

Observaciones: Se podrá hacer la tutoría en cualquier otro horario previo acuerdo entre el profesor y el o la estudiante

Tutorías segundo cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Despacho
Todo el cuatrimestre		Lunes	13:00	15:00	Sección de Química - AN.3F	Despacho 4 del Área de Química Analítica. 2º planta de la Sección de Química
Todo el cuatrimestre		Miércoles	13:00	15:00	Sección de Química - AN.3F	Despacho 4 del Área de Química Analítica. 2º planta de la Sección de Química

Todo el cuatrimestre		Viernes	13:00	15:00	Sección de Química - AN.3F	Despacho 4 del Área de Química Analítica. 2º planta de la Sección de Química
Observaciones: Se podrá hacer la tutoría en cualquier otro horario previo acuerdo entre el profesor y el o la estudiante						

4. Contextualización de la asignatura en el plan de estudio

Bloque formativo al que pertenece la asignatura: **Química Medioambiental**
 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

Bloque I: Clasificación

- Tema 1. Introducción a la clasificación.
- Tema 2. Análisis de componentes principales (PCA).
- Tema 3. Análisis discriminante lineal (LDA) y cuadrático (QDA)
- Tema 4. Método del entorno próximo (k-NN)

Bloque II: Calibración multivariante

- Tema 5. Introducción a la calibración multivariante
- Tema 6. Regresión lineal múltiple (MLR)
- Tema 7. Regresión en componentes principales (PCR)
- Tema 8. Regresión en mínimos cuadrados parciales (PLS)

Bloque III: Sistemas expertos

- Tema 9. Introducción a los sistemas expertos.
- Tema 10. Redes neuronales y algoritmos genéticos.

Actividades a desarrollar en otro idioma

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 alumnado 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 del alumnado 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.** Se explicará y abordará el manejo de distintos paquetes informáticos de uso frecuente en el tratamiento de datos químicos. El alumnado utilizará una parte del tiempo correspondiente a las prácticas, así como su tiempo de trabajo personal, para realizar los ejercicios seleccionados por el profesor 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	[CE07], [CE06], [CB10], [CB07], [CB06]
Clases prácticas (aula / sala de demostraciones / prácticas laboratorio)	12,00	0,00	12,0	[CE07], [CE06], [CB10], [CB07], [CB06]
Asistencia a tutorías	2,00	0,00	2,0	[CE07], [CE06], [CB10], [CB07], [CB06]
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	[CE07], [CE06], [CB10], [CB07], [CB06]
Estudio autónomo	0,00	20,00	20,0	[CE07], [CE06], [CB10], [CB07]
Total horas	30,00	45,00	75,00	
		Total ECTS	3,00	

8. Bibliografía / Recursos

Bibliografía Básica

- Otto, M.: Chemometrics, Wiley-VCH, Alemania, 1999.
- Mongay Fernández, C: Quimiometría, Universitat de Valencia, Valencia, 2005.
- Massart, D.L., Vandeginste, B.G.M., Deming, S.N., Micote, Y. y Kauffman, L.: Chemometrics: a Textbook, Elsevier, Amsterdam, 1988.
- Ramis-Ramos, G. y García Álvarez-Coque, M.C.: Quimiometría, Síntesis, Madrid, 2001.

Bibliografía Complementaria

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

Otros Recursos

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

9. Sistema de evaluación y calificación

Descripción

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

- Clases de teoría. Asistencia y participación activa: 5%
- Clases prácticas. Asistencia, participación, organización del trabajo, realización de ejercicios, etc.: 10%
- Grabación de un video donde se explique en directo como resolver un problema concreto (manejo del software e interpretación de resultados): 20 %
- Entrega de problemas propuestos por el profesor: 30 %
- Participación en una wiki por grupos donde se resuelva un problema en equipo: 15%
- Evaluación de los informes de las prácticas: 20%

La asistencia a las clases prácticas es obligatoria, para poder aprobar la asignatura se deberán haber realizado las prácticas.

Por defecto todo el estudiantado será evaluado por la modalidad de evaluación continua. No obstante, existe la posibilidad de ser evaluado mediante un único examen final (renunciar a la evaluación continua). Para acogerse a esta modalidad, el estudiantado deberá comunicarlo al profesor mediante el procedimiento habilitado en el aula virtual en el plazo de un mes a partir del inicio de las clases.

En la evaluación única de las diferentes convocatorias se realizará 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]	Se valorará: - dominio de los conocimientos teóricos y prácticos de la materia - cumplir los plazos de entrega - resultados y discusión - razonamiento crítico - capacidad de análisis y síntesis - capacidad de organización y planificación	65,00 %

Informes memorias de prácticas	[CE07], [CE06], [CB10], [CB07], [CB06]	Evaluación de las actividades no presenciales relacionadas con las clases prácticas: memorias, informes de las prácticas o ejercicios resueltos entregados. Se valorará: - ortografía y presentación - cumplir los plazos de entrega - resultados, discusión e interpretación de los resultados - razonamiento crítico - capacidad de análisis y síntesis	20,00 %
Técnicas de observación	[CE07], [CE06], [CB10], [CB07], [CB06]	Evaluación continua: Control de asistencia y participación activa en las actividades de teoría (5 %) y las prácticas (10 %) Se valorará: - dominio de los conocimientos teóricos y prácticos de la materia - participación activa - capacidad de organización y planificación - capacidad de análisis y síntesis	15,00 %

10. Resultados de Aprendizaje

Al finalizar esta asignatura se espera que el estudiante sea capaz de:

- Reconocer las distintas técnicas multivariantes de análisis exploratorio de datos y de calibración
- Aplicar las técnicas multivariantes a la resolución de problemas, tanto de análisis supervisado como no supervisado, en función de los objetivos planteados.

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.

Segundo cuatrimestre

Semana	Temas	Actividades de enseñanza aprendizaje	Horas de trabajo presencial	Horas de trabajo autónomo	Total

Semana 1:	Tema1-5	Clases de teoría Prácticas aula de informática Tutorías	7.50	11.25	18.75
Semana 2:	Tema 6-7	Clases de teoría Prácticas aula de informática Tutorías	7.50	11.25	18.75
Semana 3:	Tema 7-8	Clases de teoría Prácticas aula de informática Tutorías	7.50	11.25	18.75
Semana 4:	Tema 8-10	Clases de teoría Prácticas aula de informática Tutorías	7.50	11.25	18.75
Total			30.00	45.00	75.00