Escuela de Doctorado
y Estudios de Posgrado
Universidad de La Laguna

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
(2026 - 2027)

1. Datos descriptivos de la asignatura

Asignatura: Aplicaciones del análisis multivariante en química analítica agroalimentaria y medioambiental	Código: 835931912

- 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 de matrícula y calificación

3. Profesorado que imparte la asignatura

Profesor/a Coordinador/a: ELADIA MARIA PEÑA MENDEZ

- Grupo: **Único**

General
- Nombre: **ELADIA MARIA**
- Apellido: **PEÑA MENDEZ**
- Departamento: **Química**
- Área de conocimiento: **Química Analítica**

Contacto
- Teléfono 1: **922318049**
- Teléfono 2:
- Correo electrónico: **empena@ull.es**
- Correo alternativo: **empena@ull.edu.es**
- Web: **http://www.campusvirtual.ull.es**

Tutorías primer cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Planta	Despacho
Todo el cuatrimestre		Lunes	12:00	15:00	Sección de Química - AN.3F	2	16
Todo el cuatrimestre		Miércoles			Sección de Química - AN.3F	2	16

Observaciones: Será posible concertar por email cita para tutorías fuera del horario de tutorías de despacho de la profesora. Previo acuerdo con la profesora, será posible utilizar el programa Meet para concertar citas de tutorías si no fuera posible asistir de forma física a la tutoría de despacho.

Tutorías segundo cuatrimestre:

Desde	Hasta	Día	Hora inicial	Hora final	Localización	Planta	Despacho
Todo el cuatrimestre		Lunes	12:00	15:00	Sección de Química - AN.3F	2	16
Todo el cuatrimestre		Miércoles			Sección de Química - AN.3F	2	16

Observaciones: Será posible concertar por email cita para tutorías fuera del horario de tutorías de despacho de la profesora. Previo acuerdo con la profesora, será posible utilizar el programa Meet para concertar citas de tutorías si no fuera posible asistir de forma física a la tutoría de despacho.

Profesor/a: **ANA ISABEL JIMENEZ ABIZANDA**

- Grupo: **Único**

General
- Nombre: **ANA ISABEL**
- Apellido: **JIMENEZ ABIZANDA**
- Departamento: **Química**
- Área de conocimiento: **Química Analítica**

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	Planta	Despacho

Todo el cuatrimestre		Lunes	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	2ª	8
Todo el cuatrimestre		Miércoles	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	2ª	8
Todo el cuatrimestre		Viernes	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	2ª	8
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**	**Planta**	**Despacho**
Todo el cuatrimestre		Lunes	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	2ª	8
Todo el cuatrimestre		Miércoles	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	2ª	8
Todo el cuatrimestre		Jueves	12:00	14:00	Sección de Química - AN.3F	2ª	8
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: **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

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

Modelo de Enseñanza Centrada en el Alumnado

Aplica el Modelo de Enseñanza Centrada en el Alumnado (MECA - ULL)
Aprendizaje basado en Problemas (PBL)

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.
La asignatura estará apoyada en todo momento por un aula virtual. Asimismo, se podrá utilizar la mensajería de la plataforma para aclarar dudas o realizar consultas. Con igual propósito se podrá utilizar el foro creado para esta finalidad.

La IA puede ser usada como una primera aproximación a un problema pero es necesario analizar las respuestas de manera crítica, contrastando la información, para llegar a un resultado creativo que permita el aprendizaje y evite algunos de los problemas derivados del uso de la IA.

En caso de situaciones de riesgo derivadas de fenómenos meteorológicos adversos, se seguirán las siguientes directrices:
- Si se declara en la Universidad de La Laguna nivel 2 (amarillo), las actividades docentes se desarrollarán conforme a las directrices marcadas por la Universidad de La Laguna.
- Si se declara en la Universidad de La Laguna nivel 3 (naranja) o 4 (rojo), se suspenderán las actividades docentes presenciales, y previa información al alumnado por los canales disponibles, se actuará para garantizar la continuidad del aprendizaje y la atención al alumnado mientras se mantengan estos niveles de alerta.

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], [CB10], [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], [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]
Estudio autónomo	0,00	20,00	20,0	[CB07], [CB10], [CE06], [CE07]
Total horas	30,00	45,00	75,00	
		Total ECTS	3,00	

8. Bibliografía / Recursos

Bibliografía Básica

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

Miller, J.N. and Miller J.C.: Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry, 10th edition, Pearson Education Limited, Harlow, 2010.

Bedson, P. and Farrant, TJD. Practical Statistics for the Analytical Scientist: A Bench Guide, RSC Publishing, 2009.

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

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.

Moore, D. Estadística aplicada básica. Edición en castellano: Antoni Bosch editor, Barcelona, 2000.

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** (EvC) que consta de los siguientes elementos:
Control de asistencia y participación activa en las clases de teoría y prácticas: organización del trabajo, realización de ejercicios, etc.:

- **15%**

Realización de **cuestionarios** u otras actividades a través del aula virtual: **20 %**

- .

Se realizarán **4 cuestionarios** a través del aula virtual, en las semanas 2, 3, 4 y 5. Cada uno de los cuestionarios tendrá una ponderación del **5 %**• en la calificación final.
Actividades no presenciales relacionadas con las clases prácticas: ejercicios, memorias y/o informes de las prácticas

- **: 20 %**

Cada semana, durante las semanas 2, 3, 4 y 5, se presentará a través del aula virtual, un trabajo que consistirá en la resolución de problemas propuestos o alguna otra tarea relacionada con los contenidos de la asignatura. Cada uno de estos **4 trabajos** tendrá una ponderación del **5 %**• en la calificación final.
Participación en foros o un wiki donde se resuelva un problema en grupo, etc.:

- **15 %**

Grabación de un video donde de explique en directo como resolver un problema concreto (manejo del software e interpretación de resultados):

- **10 %**
- **Trabajo final: 20%**

• Consistirá en la realización de un trabajo, proyecto o ejercicio realizado de forma autónoma por parte del alumnado que será entregado quince días después de finalizar la docencia teórico-práctica de la asignatura.
La asistencia a las clases prácticas es obligatoria. Para poder aprobar la asignatura es necesario haber realizado las prácticas.

Por defecto todo el estudiantado será evaluado por la modalidad de **evaluación continua** (EvC).
Para que el estudiantado pueda optar a la **evaluación única** (EvC) deberá comunicarlo a través del procedimiento habilitado en el aula virtual de la

asignatura antes de haberse presentado a las actividades cuya ponderación computen el 40 % de la evaluación continua (art. 5.5 del REC).
Una vez se ha asistido al 50 % de las clases teórico-prácticas y se han presentado todas las actividades que conforman los apartados 2 y 3 se considerará agotada la evaluación continua, según lo especificado en el artículo 4 del Reglamento de Evaluación y Calificación de la ULL.
La **evaluación única** (EvU) se llevará a cabo en las dos convocatorias de la asignatura. Consistirá en una prueba de evaluación escrita teórico-práctica sobre los contenidos de la asignatura. La calificación de esta prueba será la calificación final de la asignatura.
El alumnado que no supere la evaluación continua en la primera convocatoria será evaluado en las restantes convocatorias del curso según se recoge en la modalidad de evaluación única.

Observaciones sobre la detección de fraude académico: en cumplimiento del Reglamento de Convivencia de la Universidad de La Laguna (art. 16.4), se informa al estudiantado de que durante las pruebas de evaluación presenciales podrán utilizarse dispositivos detectores pasivos de radiofrecuencia y campos magnéticos. Estos dispositivos no emiten señales, no interfieren con las comunicaciones y no registran datos personales. La tenencia y/o uso de dispositivos electrónicos no autorizados podrá constituir infracción disciplinaria conforme a la Ley 3/2022 y al Reglamento de Régimen Disciplinario del Estudiantado de la ULL. Los estudiantes portadores de dispositivos médicos electrónicos deberán comunicarlo antes del inicio de la prueba.

Estrategia Evaluativa

Tipo de prueba	Competencias	Criterios	Ponderación
Trabajos y proyectos	[CB06], [CB07], [CB10], [CE06], [CE07]	**SE2 – Evaluación continua: Evaluación de los trabajos, proyectos y ejercicios realizados a propuesta del profesorado** 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	30,00 %
Informes memorias de prácticas	[CB06], [CB07], [CB10], [CE06], [CE07]	**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:** 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 %

Pruebas de ejecuciones de tareas reales y/o simuladas	[CE06], [CE07]	SE4 – Evaluación continua: Realización de cuestionarios o otras actividades (participación en foros, wiki, …) en aula virtual Se valorará: • el dominio de los conocimientos teóricos y prácticos de la materia • el número de respuestas correctas en un corto espacio de tiempo • razonamiento crítico	35,00 %
Técnicas de observación	[CB06], [CB07], [CB10], [CE06], [CE07]	SE1 – Evaluación continua: Control de asistencia y participación activa en todas las actividades de la asignatura (5%) SE6 - Evaluación continua del estudiante en las clases en el aula de informática (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:			0.00	0.00	0.00
Semana 2:			0.00	0.00	0.00
Semana 3:			0.00	0.00	0.00
Semana 4:			0.00	0.00	0.00
Semana 5:	Tema 1	Clases de teoría Prácticas aula de informática Tutorías	3.00	4.00	7.00
Semana 6:	Tema 2 Tema 3 Tema 4	Clases de teoría Prácticas aula de informática Tutorías Cuestionario Temas 1 - 4 Tarea Temas 1 - 4	7.50	10.00	17.50
Semana 7:	Tema 4 Tema 5 Tema 6	Clases de teoría Prácticas aula de informática Tutorías Cuestionario Temas 5 - 6 Tarea Temas 5 - 6	7.50	10.00	17.50
Semana 8:	Tema 6 Tema 7 Tema 8	Clases de teoría Prácticas aula de informática Tutorías Cuestionario Temas 7 - 8 Tarea Temas 7 - 8	4.50	6.00	10.50
Semana 9:	Tema 9 Tema 10	Clases de teoría Prácticas aula de informática Tutorías	7.50	10.00	17.50
Semana 10:	Preparación del Trabajo final	Trabajo autónomo: preparación del trabajo final	0.00	5.00	5.00
		Total	30.00	45.00	75.00