

TRATAMIENTO DE MUESTRAS Y ANÁLISIS DE DATOS

Curso 2014/2015

(Código:61034088)

1. PRESENTACIÓN DE LA ASIGNATURA

Las necesidades que tiene nuestra sociedad en el momento actual, en cuanto a información química se refiere, son muy distintas de los años que nos han precedido. Cada vez precisamos determinar sustancias en cantidades más pequeñas, en muestras más complejas y de una forma más rápida y eficiente. Por ejemplo, los conceptos de calidad y seguridad alimentaria no se entenderían sin la aplicación de las nuevas herramientas analíticas que se aplican, desde el control de las materias primas y productos, a la determinación de sustancias y aditivos nocivos en los alimentos. Estas necesidades de información son extrapolables a otros muchos ámbitos de la vida como el medio ambiente, la salud, etc.

Por tanto, los objetivos de la Química Analítica son ahora mucho más ambiciosos que los planteados anteriormente, por lo que el papel del químico analítico debe adaptarse a estas nuevas necesidades.

El proceso de medida en Química Analítica debe ser entendido como un conjunto de operaciones que separa a la muestra de los resultados obtenidos, expresados e interpretados según el planteamiento del problema analítico a resolver.

En esta asignatura se abordan los contenidos necesarios para que el estudiante pueda afrontar de forma apropiada el proceso de medida en Química Analítica, incidiendo en la etapa inicial del proceso (planificación del experimento, toma y tratamiento de muestras) y en su etapa final (tratamiento estadístico de los datos y análisis de resultados), dado que son los dos aspectos más importantes que pueden afectar a la calidad de la información analítica.

La disponibilidad de instrumentos "inteligentes", así como la automatización e informatización del laboratorio, ha impulsado la transformación de la Química Analítica en una "Ciencia de información química". Por lo que, además de conocimientos de Química, los químicos analíticos deben ahora adquirir conocimientos de Matemáticas, Estadística e Informática para trabajar con eficacia, y poder establecer el resultado de un análisis químico de forma apropiada. La Quimiometría es la disciplina que analiza e interpreta los datos obtenidos proporcionando la máxima información química mediante el análisis de los datos, y cuyo conocimiento y manejo es imprescindible en el tratamiento de datos. Esta disciplina constituye, junto a la toma y tratamiento de muestra, uno de los bloques que configuran esta asignatura.

2. CONTEXTUALIZACIÓN EN EL PLAN DE ESTUDIOS

La asignatura *Tratamiento de muestras y análisis de datos* (5 créditos ECTS) queda englobada en el Grado en Química, y se imparte desde el Departamento de Ciencias Analíticas de la Facultad de Ciencias de la UNED, durante el primer semestre del 4º Curso del Grado y tiene carácter optativo.

Los contenidos de esta asignatura se relacionan y complementan los tratados en otras asignaturas cursadas en anteriores cursos. De entre ellas destacamos:

- *Cálculo numérico y Estadística aplicada*. Obligatoria, 2º Curso, 5 ECTS. Sus contenidos incluyen una introducción a los cálculos estadísticos, análisis y propagación de errores de datos experimentales.
- *Introducción a la Experimentación en Química Física y Química Analítica*. Obligatoria, 2º Curso, 6 ECTS. En esta



asignatura eminentemente experimental se aplica el cálculo estadístico de errores, expresando las magnitudes medidas y calculadas con la unidades y precisión adecuadas.

- *Química Analítica Instrumental*. Obligatoria, 3er Curso, 6 ECTS. En esta asignatura se aborda el estudio de la señal instrumental, y se introducen los conceptos de regresión y calibrado analítico univariante.
- *Experimentación en Química Física y Química Analítica*. Obligatoria, 3er Curso, 6 ECTS. En esta asignatura práctica se estudian y realizan experimentos de muestreo y tratamiento de muestras, así como la evaluación crítica de los resultados obtenidos en el laboratorio mediante el empleo adecuado de métodos estadísticos de significación y calibración univariante.

3. REQUISITOS PREVIOS REQUERIDOS PARA CURSAR LA ASIGNATURA

Aunque no hay especificada ninguna asignatura que deba superarse para cursar la asignatura *Tratamiento de muestras y análisis de datos*, la Memoria del Grado en Química, indica que el estudiante deberá haber cursado al menos 150 ECTS en asignaturas correspondientes a los tres primeros curso para poder acceder a ella.

También será requisito imprescindible, que el estudiante tenga acceso a un ordenador personal con conexión a internet, para realizar las actividades propuestas y poder seguir el curso desde la plataforma educativa aLF de la UNED. También es necesario que el estudiante tenga conocimientos básicos de inglés para consultar bibliografía científica.

4. RESULTADOS DE APRENDIZAJE

En esta asignatura se pretende que los estudiantes adquieran y desarrollen una serie de competencias específicas y genéricas, que constituirán el resultado de su aprendizaje y que se resumen a continuación.

Las competencias específicas a desarrollar, propias de la disciplina son:

- Conocer y comprender las diferentes etapas de la medida en Química.
- Comprender la importancia de los procesos de toma y tratamiento de muestras en los resultados analíticos.
- Diferenciar las diferentes técnicas de muestreo, pretratamiento, conservación y tratamiento de muestras.
- Comprender el fundamento de las diferentes técnicas utilizadas en la preparación de la muestra para la determinación de analitos inorgánicos y orgánicos.
- Conocer y comprender las principales herramientas estadísticas para el cálculo de la incertidumbre.
- Conocer y aprender a aplicar la estadística de medidas repetidas y pruebas de significación.
- Comprender la importancia de la calibración en el análisis instrumental, aplicando el método de regresión de mínimos cuadrados.
- Evaluar y presentar los datos mediante herramientas estadísticas (estadística de medidas repetidas, pruebas de significación, regresión y correlación, etc.)
- Conocer y calcular los criterios de calidad de un método analítico.
- Comprender e interpretar los resultados analíticos mediante el análisis de componentes principales y métodos clasificatorios
- Comprender e interpretar los resultados del análisis de datos multivariante.

Las competencias genéricas que se intentan potenciar y desarrollar en esta asignatura son:

- Capacidad de análisis y síntesis
- Capacidad de organización y planificación
- Comunicación oral y escrita en lengua nativa
- Conocimiento de una lengua extranjera



- Conocimientos de informática relativos al ámbito de estudio y capacidad para utilizar las nuevas tecnologías de la información y la comunicación
- Capacidad de gestión de la información
- Resolución de problemas
- Toma de decisiones
- Trabajo en equipo, habilidades en las relaciones interpersonales
- Razonamiento crítico
- Aprendizaje autónomo
- Creatividad
- Liderazgo
- Sensibilidad hacia temas medioambientales y compromiso ético

5.CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA

El contenido de esta asignatura se ha estructurado en dos bloques temáticos: Toma y tratamiento de muestras y Quimiometría, divididos en 10 unidades didácticas.

Bloque Temático I. Toma y tratamiento de muestras

- U.D. 1. Toma de muestra
- U.D. 2. Tratamiento de muestra
- U.D. 3. Preparación de la muestra para la determinación de analitos inorgánicos
- U.D. 4. Preparación de la muestra para la determinación de analitos orgánicos

Bloque Temático II. Quimiometría

- U.D. 5. Química y estadística descriptiva
- U.D. 6. Pruebas de significación
- U.D. 7. Calibración y regresión lineal simple o univariante
- U.D. 8. Validación de un método de análisis
- U.D. 9. Análisis de componentes principales y clasificatorios
- U.D. 10. Análisis de datos multivariantes

6.EQUIPO DOCENTE

- [PILAR FERNANDEZ HERNANDO](#)
- [ALEJANDRINA GALLEG0 PICO](#)

7.METODOLOGÍA Y ACTIVIDADES DE APRENDIZAJE

Para seguir el curso de *Tratamiento de muestras y análisis de datos* se empleará la metodología de la UNED, con el apoyo constante del Equipo Docente y Profesores Tutores (o Intercampus) de los diferentes Centros Asociados, empleando, fundamentalmente, la plataforma virtual *aLF* a través de internet. Al estudiante matriculado se le indicarán los pasos a seguir para conectarse a la citada plataforma.

Para el desarrollo de las actividades de aprendizaje de la asignatura se ha elaborado una *Guía de Estudio*, que se



encuentra depositada en el curso virtual de la plataforma aLF, donde se recoge detalladamente el plan de trabajo, cronograma, y las orientaciones específicas para alcanzar con éxito los objetivos fijados.

El estudiante deberá realizar una serie de actividades evaluables (Pruebas de Evaluación Continua, PEC), que se propondrán a través del curso virtual de la asignatura, siempre con la ayuda del Equipo Docente de la Sede Central de la UNED y los Profesores tutores.

El estudiante también deberá realizar una prueba presencial obligatoria en los Centros Asociados, según el calendario establecido por la UNED.

Actividades (Evaluación continua)

- Prueba Personal Presencial (enero/febrero o septiembre)
- Comentarios de artículos de interés científico o social (en casos especiales o cuando se requiera)
- Pruebas de Evaluación Continua

8.EVALUACIÓN

La asignatura se evaluará de forma continuada teniendo en cuenta las calificaciones que obtenga el estudiante en cada una de las actividades propuestas, que constituirá el 30 % de la nota, y de una prueba presencial, que será el 70 % de la calificación global.

Prueba presencial

El estudiante tendrá que realizar un examen teórico-práctico (que se desarrollará según el calendario establecido por la UNED y en los Centros Asociados) que consistirá en una prueba escrita, a desarrollar en 2 horas.

Durante el examen podrá disponer de ningún material a excepción de Calculadora No Programable.

Será necesario obtener un 4,0 sobre 10,0 en el examen final para que se consideren los demás aspectos de la evaluación global de la asignatura. Superada la nota mínima, el examen final supone un 70 % de la nota final del curso.

9.BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ISBN(13): 9788477389040

Título: QUIMIOMETRÍA

Autor/es: Ramis Ramos, Guillermo ; García Alvarez-Coque, Celia ;

Editorial: SÍNTESIS

Buscarlo en Editorial UNED

Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

ISBN(13): 9788477389620

Título: TOMA Y TRATAMIENTO DE MUESTRAS (1ª)

Autor/es: Fernández Hernando, Pilar ; Cámara Rica, Carmen ; Pérez- Conde, Concepción ; Vidal, Miquel ;

Editorial: SÍNTESIS

Buscarlo en Editorial UNED



Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Comentarios y anexos:

Toma y Tratamiento de muestras

Dado que los dos aspectos más importantes que pueden afectar a la calidad de los resultados analíticos son básicamente la toma de muestra y su tratamiento para el análisis, la finalidad primordial de este libro es que el estudiante adquiera unos conceptos claros sobre la importancia de obtener una muestra representativa, tanto inicialmente como después de todas las etapas implicadas en su preparación para el análisis. Paralelamente, se ponen de manifiesto las fuentes de error implicadas en cada una de las etapas y la forma de evitarlas.

Quimiometría

En este libro, partiendo de los conceptos más elementales, y de forma simple y progresiva, se introduce al estudiante en el conocimiento de herramientas estadísticas de gran potencia analítica y amplísima aplicabilidad, incluyendo la exploración multivariante de datos, y la construcción, validación y uso de modelos de regresión multivariante.

10.BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

ISBN(13): 9788420535142

Título: ESTADÍSTICA Y QUIMIOMETRÍA PARA QUÍMICA ANALÍTICA (4ª)

Autor/es: Miller, Jane C. ; Miller, James N. ;

Editorial: PRENTICE-HALL

Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

Comentarios y anexos:

Estadística y quimiometría para Química Analítica (4ª Ed.)

Este libro de texto ofrece una clara y lúcida panorámica de los principios subyacentes en los métodos estadísticos. En todas las ediciones anteriores los autores han empleado una metodología que se ha demostrado eficaz para guiar a los químicos analíticos en la comprensión de esta ciencia de carácter altamente cuantitativo.

11.RECURSOS DE APOYO

La Comunidad Virtual de la asignatura se encuentra en la plataforma de teleformación de la UNED aLF, a la que se accede a través del portal de la Universidad (<http://www.uned.es>), y donde los estudiantes podrán encontrar, tablón de anuncios,



orientaciones sobre el estudio de la asignatura, materiales complementarios de estudio, y foros de comunicación y debate, entre otros.

El Equipo Docente utilizará esta Comunidad Virtual como medio de comunicación con los estudiantes matriculados. A través de esta Comunidad, el Equipo Docente informará a los estudiantes de los cambios y/o novedades que vayan surgiendo, siendo fundamental que todos los estudiantes utilicen la plataforma virtual.

Los estudiantes también podrán hacer uso de los recursos *online* disponibles en la Biblioteca de la UNED, tanto en su Sede Central como en los Centros Asociados. Entre ellos cabe destacar el acceso a catálogos, bases de datos, revistas científicas electrónicas, etc.

12.TUTORIZACIÓN

El Equipo Docente tutelaré y seguirá el aprendizaje de los estudiantes a través del Curso Virtual de la Asignatura, que será la principal herramienta de comunicación entre el Estudiante, el Profesor Tutor y el Equipo Docente.

Guardia en la Sede Central

Fac. Ciencias. Dpto. Ciencias Analíticas
c/Senda del Rey, 9 (28040 Madrid)

- *Pilar Fernández Hernando* (Miércoles de 15.00 a 19.00 horas) – Despacho 324
- *Alejandrina Gallego Picó* (Miércoles de 15.00 a 19.00 horas) – Despacho 338

Atención al estudiante (previa cita)

Si va a enviar un correo electrónico, debe constar necesariamente para ser contestado: nombre y apellidos, la asignatura en la que está matriculado, Centro Asociado donde está matriculado y un teléfono de contacto.

Pilar Fernández Hernando

Miércoles y jueves, de 10.00 a 13.30 horas

Tel.: 91 398 7284

E-mail: pfhernando@ccia.uned.es

Alejandrina Gallego Picó

Miércoles y jueves, de 10.00 a 13.30 horas

Tel.: 91 398 7364

E-mail: agallego@ccia.uned.es

