

17-18

GRADO EN QUÍMICA
CUARTO CURSO

GUÍA DE ESTUDIO PÚBLICA



TRATAMIENTO DE MUESTRAS Y ANÁLISIS DE DATOS

CÓDIGO 61034088

UNED

17-18

TRATAMIENTO DE MUESTRAS Y ANÁLISIS
DE DATOS
CÓDIGO 61034088

ÍNDICE

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN
REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR LA
ASIGNATURA
EQUIPO DOCENTE
HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE
TUTORIZACIÓN EN CENTROS ASOCIADOS
COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE
RESULTADOS DE APRENDIZAJE
CONTENIDOS
METODOLOGÍA
SISTEMA DE EVALUACIÓN
BIBLIOGRAFÍA BÁSICA
BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA
RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

Nombre de la asignatura	TRATAMIENTO DE MUESTRAS Y ANÁLISIS DE DATOS
Código	61034088
Curso académico	2017/2018
Departamento	CIENCIAS ANALÍTICAS
Título en que se imparte	GRADO EN QUÍMICA
Curso	CUARTO CURSO
Tipo	OPTATIVAS
Nº ETCS	5
Horas	125.0
Periodo	SEMESTRE 1
Idiomas en que se imparte	CASTELLANO

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN

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 la actualidad, la disponibilidad de instrumentos “inteligentes”, así como la automatización e informatización de los laboratorios, 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.

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 asignatura se ha estructurado en dos bloques temáticos. El primer bloque temático consta de cuatro unidades didácticas, y está dedicado a la toma y tratamiento de muestras. Se tratarán los aspectos claves en el proceso de muestreo, tales como el diseño de un plan de muestreo representativo, pretratamiento y conservación de la muestra, así como las etapas en la preparación de muestras de naturaleza orgánica e inorgánica. En el segundo bloque de la asignatura, que constará de seis unidades didácticas, se abordarán diferentes aspectos del análisis de datos y el empleo de herramientas quimiométricas.

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 con los tratados en otras asignaturas programadas en cursos anteriores. 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 las 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.

REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES 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* de la UNED recoge en su planificación que para asignaturas cuyo objetivo es adquirir conocimientos sobre ámbitos concretos de la Química aplicada (Módulo de Química Aplicada), el estudiante deberá haber cursado al menos 150 ECTS en asignaturas correspondientes en los tres primeros cursos.

También será requisito recomendable, que el estudiante tenga habilidades informáticas, a nivel de usuario, para realizar algunas de las actividades propuestas y el seguimiento del curso desde la plataforma educativa virtual *aLF* de la UNED. Por otro lado, también será importante que posea unos conocimientos básicos de inglés para manejar bibliografía científica complementaria.

EQUIPO DOCENTE

Nombre y Apellidos
Correo Electrónico
Teléfono
Facultad
Departamento

AGUSTIN GONZALEZ CREVILLEN
agustingcrevillen@ccia.uned.es
91398-7367
FACULTAD DE CIENCIAS
CIENCIAS ANALÍTICAS

Nombre y Apellidos
Correo Electrónico
Teléfono
Facultad
Departamento

ANTONIO ZAPARDIEL PALENZUELA
azapardiel@ccia.uned.es
91398-7361
FACULTAD DE CIENCIAS
CIENCIAS ANALÍTICAS

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

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.

Horario de atención del Equipo Docente

Profesora: Alejandrina Gallego Picó

Horario de atención: miércoles, de 15:00 a 19:00 h

Teléfono: 91 398 7364

Correo electrónico: agallego@ccia.uned.es

Profesor: Agustín González Crevillén

Horario de atención: Jueves, de 15:00 a 19:00 h

Teléfono: 91 398 7367

Correo electrónico: agustingcrevillen@ccia.uned.es

TUTORIZACIÓN EN CENTROS ASOCIADOS

COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE

En esta asignatura se pretende que los estudiantes adquieran y desarrollen una serie de competencias específicas y genéricas, que les permitirán alcanzar los objetivos y resultados de aprendizaje previstos.

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

- CE1-C Conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química
- CE2-C Conocimiento de la terminología química: nomenclatura, términos, convenios y unidades
- CE3-C Conocimiento de los principios fisicoquímicos fundamentales que rigen la Química y sus relaciones entre áreas de la Química
- CE5-C Conocimiento de los procesos de medida en Química para extraer información de calidad sobre objetos naturales y artificiales
- CE6-C Conocimiento del impacto práctico de la Química en la vida: industria, medio ambiente, farmacia, salud, agroalimentación, etc
- CE8-C Una base de conocimientos que posibilite continuar los estudios en áreas especializadas de Química o áreas multidisciplinares, y en múltiples dominios de aplicación, tanto tradicionales como nuevos
- CE9-C Conocimiento y comprensión de los conceptos matemáticos y físicos necesarios para el estudio de la Química
- CE10-H Capacidad para planificar y realizar experimentos de forma independiente, así como describir, analizar y evaluar críticamente los datos experimentales obtenidos

- CE11-H Capacidad para aplicar sus conocimientos químicos, teóricos y prácticos, a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos en los ámbitos de la Química
- CE12-H Habilidad para obtener datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio y para interpretarlos en términos de significación y de las teorías que los sustentan
- CE13-H Habilidad para manejar con seguridad materiales químicos
- CE14-H Capacidad para valorar los riesgos derivados del uso de sustancias químicas y procedimientos de laboratorio
- CE16-H Habilidad para manejar la instrumentación química estándar que se utiliza para investigaciones
- CE17-H Capacidad de aplicar los conocimientos de Química a un desarrollo sostenible en los contextos industrial, económico, medioambiental y social
- CE18-H Habilidad para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
- CE19-H Habilidad para llevar a cabo la monitorización, observación y medida de las propiedades químicas, sucesos o cambios
- CE20-H Capacidad para relacionar la Química con otras disciplinas
- CE21-H Manejo de los modelos abstractos aplicables al estudio de la Química
- CE22-H Capacidad de aplicar los conocimientos de Matemáticas y Física a la resolución de problemas en el ámbito de la Química

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

- CG1 Iniciativa y motivación
- CG2 Planificación y organización
- CG3 Manejo adecuado del tiempo
- CG4 Análisis y Síntesis
- CG5 Aplicación de los conocimientos a la práctica
- CG6 Razonamiento crítico
- CG7 Toma de decisiones
- CG8 Seguimiento, monitorización y evaluación del trabajo propio o de otros
- CG9 Motivación por la calidad
- CG10 Comunicación y expresión escrita
- CG11 Comunicación y expresión oral
- CG12 Comunicación y expresión en otras lenguas (con especial énfasis en el inglés)
- CG13 Comunicación y expresión matemática, científica y tecnológica
- CG14 Competencia en el uso de las TIC
- CG15 Competencia en la búsqueda de información relevante
- CG16 Competencia en la gestión y organización de la información
- CG17 Competencia en la recolección de datos, el manejo de bases de datos y su presentación

- CG18 Habilidad para coordinar con el trabajo de otros
- CG19 Compromiso ético (por ejemplo en la realización de trabajos sin plagios, etc)
- CG20 Ética profesional
- CG21 Sensibilidad hacia temas medioambientales

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Los principales resultados de aprendizaje que se pretenden obtener en el curso de esta asignatura son:

- Conocer e identificar 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.

CONTENIDOS

BLOQUE I - TOMA Y TRATAMIENTO DE MUESTRA

UD 1 - Toma de muestra

UD 2 - Tratamientos previos de muestra: pretratamientos, transporte y conservación de la muestra

UD 3 - Preparación de la muestra para la determinación de analitos inorgánicos

UD 4 - Preparación de la muestra para la determinación de analitos orgánicos

BLOQUE II - QUIMIOMETRÍA

UD 5 - Estadística descriptiva aplicada a la Química Analítica

UD 6 - Pruebas de significación

UD 7 - Calibración y regresión lineal simple o univariante

UD 8 - Validación de un método de análisis

UD 9 - Análisis de componentes principales y clasificatorios

UD 10 - Análisis de datos multivariantes

COMENTARIOS

METODOLOGÍA

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) asignados, empleando, fundamentalmente, la plataforma virtual *aLF* como medio de información e interacción.

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

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

SISTEMA DE EVALUACIÓN**TIPO DE PRUEBA PRESENCIAL**

Tipo de examen	Examen de desarrollo
Preguntas desarrollo	5
Duración del examen	120 (minutos)
Material permitido en el examen	

Durante el examen presencial únicamente se podrá disponer de **calculadora NO programable** para realizar los cálculos numéricos.

Criterios de evaluación

La evaluación de la asignatura se realizará mediante la valoración de las diferentes actividades propuestas en el Plan de Trabajo:

Se valorará especialmente la correcta resolución de los problemas planteados en las PEC. Este aspecto supone el 30% de la nota final del curso.

El estudiante tendrá que realizar además un examen teórico-práctico que consistirá en una prueba escrita y que supone el 70% de la nota final. Será necesario obtener un 4,0 sobre 10,0 en el examen final para que se consideren los demás aspectos de la evaluación continua de la asignatura.

Los estudiantes que no hayan realizado las pruebas de evaluación continua y concurren exclusivamente al examen deberán obtener un 5,0 sobre 10,0 en el examen final para superar la asignatura. Además su examen constará de una pregunta de desarrollo adicional. Para estos estudiantes, esta última pregunta supondrá el 30% de la nota del examen.

% del examen sobre la nota final	70
Nota del examen para aprobar sin PEC	5
Nota máxima que aporta el examen a la calificación final sin PEC	10
Nota mínima en el examen para sumar la PEC	4

Comentarios y observaciones

En la Guía de Estudios que el estudiante encontrará en el aula virtual se especifican más detalladamente las pruebas y criterios de evaluación

PRUEBAS DE EVALUACIÓN CONTINUA (PEC)

¿Hay PEC?

Descripción

Los estudiantes tienen la opción de ser evaluados de una forma continuada, es decir las actividades que realicen durante el curso también serán parte de su nota, además de la nota de la prueba presencial.

Aquellos estudiantes que decidan NO REALIZAR las Pruebas de Evaluación Continua (PEC), deberán comunicarlo al inicio del curso al Equipo Docente de la Sede Central. En el caso de que no entreguen la primera PEC en el plazo fijado, el Equipo Docente entenderá que el estudiante renuncia a este tipo de evaluación.

Si el estudiante opta por la evaluación continua, deberá realizar obligatoriamente determinadas actividades:

Actividades propuestas

Con la realización de las pruebas de evaluación continua se pretende profundizar en los conocimientos recogidos en la parte teórica de la asignatura. Se proponen dos pruebas, que deben realizarse de forma autónoma por el estudiante, y con las que se abarcará de forma global los contenidos teórico-prácticos de la asignatura, permitiendo al estudiante tener una visión general y práctica de los mismos.

PEC 1. Estudios de significación y calibración univariante.

PEC 2. Interpretación de diseño de experimentos y resultados analíticos mediante métodos multivariantes.

Los supuestos propuestos están dirigidos a desarrollar las competencias adquiridas en el Bloque Temático II, pero también incluirán cuestiones relacionadas con el Bloque Temático I.

El Supuesto 2 es la principal prueba de evaluación de los contenidos recogidos en las Unidades Didácticas 9 y 10, de ahí la importancia de su correcta realización.

Criterios de evaluación

Ver apartado anterior

Ponderación de la PEC en la nota final 30%

Fecha aproximada de entrega --/--/--

Comentarios y observaciones

En la Guía de Estudios que el estudiante encontrará en el aula virtual se especifican los más detalladamente las pruebas y criterios de evaluación

OTRAS ACTIVIDADES EVALUABLES

¿Hay otra/s actividad/es evaluable/s?

Descripción

No están previstas otras actividades evaluables

Criterios de evaluación

No hay criterios de evaluación definidos

Ponderación en la nota final

Fecha aproximada de entrega

Comentarios y observaciones

No hay comentarios

¿CÓMO SE OBTIENE LA NOTA FINAL?

Estudiantes que siguen la evaluación continua:

PEC 30% de la nota final

Examen 70% de la nota final

(será necesario obtener un 4,0 sobre 10,0 en el examen para que se consideren los demás aspectos de la evaluación continua)

Estudiantes que NO realizan la evaluación continua:

Examen 100% de la nota final

(será necesario obtener un 5,0 sobre 10,0 en el examen para que se consideren los demás aspectos de la evaluación continua)

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ISBN(13):9788477389040

Título:QUIMIOMETRÍA

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

Editorial:SÍNTESIS

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

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.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

ISBN(13):9788299333030

Título: MULTIVARIATE DATA ANALYSIS-IN PRACTICE

Autor/es: Esbensen, K.H. ;

Editorial: CAMO Software

ISBN(13):9788479789985

Título: TRATAMIENTO DE DATOS CON R STATISTICAS Y SPSS

Autor/es: Vaamonde Liste, A. ; Guisande González, C ;

Editorial: DIAZ DE SANTOS

TRATAMIENTO DE DATOS CON R STATISTICAS Y SPSS

El objetivo de este libro es presentar las técnicas estadísticas de análisis de datos de manera que puedan ser utilizadas por los investigadores de cualquier campo de conocimiento. No está dirigido a los especialistas en Estadística, sino a los usuarios que necesitan la estadística como herramienta en su investigación. Por ello, el enfoque es eminentemente práctico: se muestra no solo cómo y por qué funcionan los diferentes métodos, sino también el modo en que pueden ser aplicados con algunos de los programas estadísticos más conocidos: R (programa gratuito), STATISTICA Y SPSS. Se utilizan múltiples ejemplos reales tomados de diferentes campos, para mostrar paso a paso como pueden superarse las dificultades que surgen habitualmente en la aplicación de las técnicas de análisis de datos. No es imprescindible, por consiguiente, que el lector tenga un buen nivel de conocimientos estadísticos.

MULTIVARIATE DATA ANALYSIS-in practice

Este libro introduce de forma práctica el diseño de experimentos y las principales herramientas multivariadas. Facilita un CD con el programa Unscrambler (Camo) y conjuntos de datos para poder trabajar y afianzar conocimientos.

RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

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 *on line* 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.

IGUALDAD DE GÉNERO

En coherencia con el valor asumido de la igualdad de género, todas las denominaciones que en esta Guía hacen referencia a órganos de gobierno unipersonales, de representación, o miembros de la comunidad universitaria y se efectúan en género masculino, cuando no se hayan sustituido por términos genéricos, se entenderán hechas indistintamente en género femenino o masculino, según el sexo del titular que los desempeñe.