

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

Código	42931
Nombre	Calibración, tratamiento de datos y calidad
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	2.0
Curso académico	2021 - 2022

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2109 - M.U. en Técnicas Experimentales en Química 11-V.2	Facultad de Química	1	Primer cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Caracter
2109 - M.U. en Técnicas Experimentales en Química 11-V.2	1 - Laboratorio avanzado de Técnicas Experimentales en Química	Obligatoria

Coordinación

Nombre	Departamento
ESCUDER GILABERT, LAURA	310 - Química Analítica
SAGRADO VIVES, SALVADOR	310 - Química Analítica

RESUMEN

Asignatura dedicada al aprendizaje práctico, en el aula de informática, de las técnicas quimiométricas avanzadas, para su empleo en diversos aspectos de interés en el laboratorio químico tales como la calibración de instrumentos, el tratamiento de datos y el aseguramiento de la calidad.

CONOCIMIENTOS PREVIOS



Relación con otras asignaturas de la misma titulación

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

Otros tipos de requisitos

Se requieren los conocimientos previos sobre química y trabajo experimental en el laboratorio de química que se imparten en las titulaciones indicadas en el perfil de ingreso recomendado para el estudiante del Máster.

COMPETENCIAS

2109 - M.U. en Técnicas Experimentales en Química 11-V.2

- Ser capaces de trabajar en equipo con eficiencia en su labor profesional o investigadora.
- Ser capaces de acceder a la información necesaria (bases de datos, artículos científicos, etc.) y tener suficiente criterio para su interpretación y empleo.
- Ser capaces de seleccionar y optimizar las variables instrumentales para obtener los mejores parámetros analíticos en las técnicas experimentales estudiadas.
- Ser capaces de emplear las herramientas básicas para el tratamiento de datos experimentales en el laboratorio.
- Realizar estudios relacionados con el análisis y/o la caracterización de sustancias químicas tales como: control de calidad, diseño de protocolos de trabajo para laboratorios, diseño e implementación de procesos de acreditación y validación, diseño y desarrollo de proyectos I+D+I, emisión de informes, certificaciones y/o dictámenes, etc.
- Ser capaces de planificar y gestionar los recursos disponibles de un laboratorio químico, teniendo en cuenta los principios básicos de la calidad, prevención de riesgos, seguridad y sostenibilidad.
- Seleccionar la instrumentación química comercializada apropiada para el estudio a realizar y de aplicar sus conocimientos para utilizarla de manera correcta.
- Elaborar una memoria clara y concisa de los resultados de su trabajo y de las conclusiones obtenidas.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Al finalizar el proceso de enseñanza-aprendizaje, el estudiante deberá ser capaz de:

- 1.- Utilizar los protocolos de calibración y verificación de instrumentos y validación de procedimientos analíticos.
- 2.- Emplear la estadística relacionada con el establecimiento de un modelo y su calidad.



- 3.- Extraer la información sobre parámetros de calidad de un método y desarrollar el experimental correspondiente.
- 4.- Caracterizar un resultado analítico.
- 5.- Organizar y caracterizar datos multivariantes.
- 6.- Ajustar protocolos de análisis multivariante en función del objetivo del problema.
- 7.- Establecer relaciones entre objetos, variables y objetos-variables.
- 8.- Calibrar ,validar y aplicar modelos de regresión multivariante.

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Calibración de instrumentos y procedimientos para el aseguramiento de la calidad.

- Diseño, evaluación y seguimiento de protocolos de calibración y verificación de instrumentos: cromatógrafos.
- Inferencia y descriptiva en la validación de procedimientos de análisis químico medioambiental, industrial, alimentario y sanitario.
- Ecuación de Horwitz, función incertidumbre y criterios de identificación.
- Caracterización de resultados analíticos obtenidos en procedimientos de análisis medioambiental, industrial, alimentario y sanitario

2. Técnicas de análisis multivariante

Análisis exploratorio de datos medioambientales mediante PCA.
Caracterización de la calidad del agua potable mediante PCA
Caracterización de la calidad del agua de playa mediante PCA
Identificación de fraudes alimentarios mediante PLS
Análisis multicomponente (Ca, Mg) en agua potable mediante PLS2
Estimación anticipada de un analito en función de otros mediante PLS

**VOLUMEN DE TRABAJO**

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Prácticas en laboratorio	20,00	100
Elaboración de trabajos individuales	6,00	0
Estudio y trabajo autónomo	12,00	0
Lecturas de material complementario	6,00	0
Preparación de actividades de evaluación	6,00	0
TOTAL	50,00	

METODOLOGÍA DOCENTE**Actividades presenciales**

Las clases de laboratorio se iniciarán con **seminarios** en los que el profesor realizará una pequeña introducción del objetivo, fundamentos y metodología experimental de las prácticas a realizar.

El profesor realizará en el laboratorio las **explicaciones** necesarias sobre el funcionamiento de los instrumentos a utilizar en cada práctica previamente a su uso por parte de los estudiantes y **tutelar**á su uso durante la realización de las prácticas, para reforzar los conocimientos sobre las técnicas empleadas.

Los estudiantes **realizarán las prácticas**, siguiendo **los protocolos o guiones de prácticas** de los que dispondrán y que podrán ser más o menos abiertos en función de cada práctica y de los objetivos específicos a adquirir en cada asignatura.

Las **actividades presenciales** realizadas en el laboratorio formarán parte de la **evaluación continua** del estudiante (Actividades formativas del verifica AF2 y Metodología docente del verifica MD1).

Se realizarán **exámenes escritos** en las fechas previstas en la programación de las **pruebas de evaluación**. (Actividades formativas del verifica AF4 y Metodología docente del verifica MD1)

Las competencias a adquirir a partir de las actividades presenciales son las siguientes:

Básicas y generales: CB7, CG1, CG3

Específicas: CE2, CE3, CE4, CE5 y CE6

Actividades no presenciales

Los estudiantes realizarán las **actividades no presenciales** solicitadas por el profesor (memorias, informes de las prácticas, etc.) y las entregarán en la fecha indicada.



Las competencias a adquirir a partir de las actividades no presenciales son las siguientes:

Específicas: CE7

EVALUACIÓN

1.-Evaluación continua del estudiante en las clases y seminarios (*asistencia participativa, manipulación del material y equipos, organización del trabajo, comprensión y empleo del guión de prácticas, realización de cálculos, trabajo en equipo, etc.*)

Durante las sesiones, centradas en la resolución de casos prácticos, se evaluará la asistencia y la participación de los alumnos de forma individual (bien contestando oralmente o por escrito a las cuestiones planteadas por el profesor, bien planteando preguntas cuya contestación sea relevante para el resto del grupo). Entre otras, dichas preguntas incluirán el diseño de protocolos de trabajo, la selección de variables y las herramientas para el tratamiento de datos (Competencias del verifica CE2, CE3, CE5 y CE6). Las sesiones prácticas se realizarán en grupos de trabajo (Competencia del verifica CG1), y se basará en el planteamiento de dudas y revisión de aspectos clave de cara a la correcta planificación del examen (sin empleo del software).

Competencias a evaluar: Específicas: CE2, CE3, CE4, CE5 y CE6

PONDERACIÓN: 40

2.-Evaluación de las actividades no presenciales (*memorias y/o informes de las prácticas entregados*)

Los informes que emitirán los alumnos incluirán las principales conclusiones derivadas del trabajo en el laboratorio (protocolos de trabajo, selección de variables y tratamiento de datos; competencias del verifica CE2, CE5, CE6 y CE7) y se llevarán a cabo en parejas para fomentar el trabajo en equipo (toma de decisiones consensuadas; competencias del verifica CG1 y CE7).

Competencias a evaluar: Específicas: CE7

PONDERACIÓN 30

3.-Exámenes escritos (*basados en los resultados de aprendizaje de la materia y en los objetivos específicos de la asignatura*)

El examen consistirá en la resolución de cuestiones o casos prácticos relacionados con las técnicas estudiadas. (Competencias del verifica CE2, CE4, CE5 y CE6).

Competencias a evaluar: Específicas: CE2, CE4, CE5 y CE6



PONDERACIÓN 30

REFERENCIAS

Básicas

- EURACHEM Quantifying Uncertainty in Analytical Measurement
www.eurachem.org/guides/QUAM2000-1.pdf

Massart D.L., B.G.M. Vandeginste, L.M.C. Buydens, S. De Jong, P.J. Lewi y J. Smeyers-Verbeke. Handbook of Chemometrics and Qualimetrics: Part A y B, Elsevier, Amsterdam, 1997.

Miller J.C. y J.N. Miller. Estadística y Quimiometría para Química Analítica. Pearson Education S.A. Madrid, 2002.

Molins-Lagua C., S. Meseguer-Lloret, Y. Moliner-Martínez y P. Campíns-Falcó. TRAC 2006 25, 282-290.

Sagrado S., E. Bonet, M.J. Medina y Y. Martín. Manual Práctico de Calidad en los Laboratorios. Enfoque ISO 17025. AENOR 2005.

ADENDA COVID-19

Esta adenda solo se activará si la situación sanitaria lo requiere y previo acuerdo del Consejo de Gobierno

Contenidos

Se mantienen los contenidos inicialmente recogidos en la guía docente.

Volumen de trabajo y planificación temporal de la docencia

Respecto al volumen de trabajo:

Se mantienen las distintas actividades descritas en la Guía Docente con la dedicación prevista.



Respecto a la planificación temporal de la docencia

no hay ninguna variación respecto a lo previsto inicialmente en la guía docente

Metodología docente

La ocupación de las aulas de informática será del 50% respecto a la ocupación habitual. Si el número de estudiantes matriculados supera el aforo del 50% del aula, los estudiantes asistirán al aula por turnos rotativos semanales (preferentemente por orden alfabético). Sin embargo, el sistema de rotación se fijará una vez conocidos los datos reales de matrícula, garantizándose, en cualquier caso, que el porcentaje de presencialidad de todos los estudiantes matriculados en la asignatura es el mismo.

La metodología utilizada para las clases no presenciales será:

1. De forma síncrona mediante las herramientas del aula virtual (Teams, Blackboard ...)
2. De forma asíncrona mediante powers locutados u otras herramientas del aula virtual
3. Resolución de ejercicios y cuestionarios

Si se produce un cierre de las instalaciones por razones sanitarias que afecte total o parcialmente a las clases de la asignatura, éstas serán sustituidas por sesiones no presenciales siguiendo los horarios establecidos y utilizando las herramientas del aula virtual.

Evaluación

Se mantiene el sistema de evaluación descrito en la Guía Docente de la asignatura en la que se han especificado las distintas actividades evaluables así como su contribución a la calificación final de la asignatura.

Si se produce un cierre de las instalaciones por razones sanitarias que afecte al desarrollo de alguna actividad evaluable presencial de la asignatura ésta será sustituida por una prueba de naturaleza similar que se realizará en modalidad virtual utilizando las herramientas informáticas licenciadas por la Universitat de València. La contribución de cada actividad evaluable a la calificación final de la asignatura permanecerá invariable, según lo establecido en esta guía.

Bibliografía

Se mantiene la bibliografía recomendada en la Guía Docente pues es accesible.