

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	42931
Nom	Calibratge, tractament de dades i qualitat
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	2.0
Curs acadèmic	2021 - 2022

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2109 - M.U. en Tècniques Experimentals en Química 11-V.2	Facultat de Química	1	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2109 - M.U. en Tècniques Experimentals en Química 11-V.2	1 - Laboratori avançat de Tècniques Experimentals en Química	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
ESCUDER GILABERT, LAURA	310 - Química Analítica
SAGRADO VIVES, SALVADOR	310 - Química Analítica

RESUM

Assignatura dedicada a l'aprenentatge pràctic, en l'aula d'informàtica, de les tècniques quimiomètriques avançades, per al seu ús en diversos aspectes d'interès en el laboratori químic com ara la calibratge d'instruments, el tractament de dades i l'assegurament de la qualitat.

CONEIXEMENTS PREVIS**Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació**

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.



Altres tipus de requisits

Es requereixen els coneixements previs sobre química i treball experimental en el laboratori de química que s'impartixen en les titulacions indicades en el perfil d'ingrés recomanat per a l'estudiant del Màster.

COMPETÈNCIES

2109 - M.U. en Tècniques Experimentals en Química 11-V.2

- Ser capaços de treballar en equip amb eficiència en la seua tasca professional o investigadora.
- Ser capaços d'accedir a la informació necessària (bases de dades, articles científics, etc.) i tenir prou criteri per a la seua interpretació i utilització.
- Ser capaços de seleccionar i optimitzar les variables instrumentals per obtenir els millors paràmetres analítics en les tècniques experimentals estudiades.
- Ser capaços d'usar les eines bàsiques per al tractament de dades experimentals al laboratori.
- Realitzar estudis realacionados amb l'anàlisi i / o la caracterització de substàncies químiques com ara: control de qualitat, disseny de protocols de treball per a laboratoris, disseny i implementació de processos d'acreditació i validació, disseny i desenvolupament de projectes I+D+I, emissió d'informes, certificacions i / o dictàmens, etc.
- Ser capaços de planificar i gestionar els recursos disponibles d'un laboratori químic, tenint en compte els principis bàsics de la qualitat, prevenció de riscos, seguretat i sostenibilitat.
- Seleccionar la instrumentació química comercialitzada apropiada per a l'estudi a arealizar i d'aplicar els seus coneixements per utilitzar-la de manera correcta.
- Elaborar una memòria clara i concisa dels resultats del seu treball i de les conclusions obtingudes.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

Al finalitzar el procés d'ensenyança-aprenentatge, l'estudiant haurà de ser capaç de:

- 1.- Utilitzar els protocols de calibratge i verificació d'instruments i validació de procediments analítics.
- 2.- Emprar l'estadística relacionada amb l'establiment d'un model i la seua qualitat.
- 3.- Extraure la informació sobre paràmetres de qualitat d'un mètode i desenrotllar l'experimental corresponent.
- 4.- Caracteritzar un resultat analític.
- 5.- Organitzar i caracteritzar dades multivariants.
- 6.- Ajustar protocols d'anàlisi multivariant en funció de l'objectiu del problema.



7.- Establir relacions entre objectes, variables i objectes-variables.

8.- Calibrar ,validar i aplicar models de regressió multivariant.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Calibratge d'instruments i procediments per a l'assegurament de la qualitat.

- Disseny, avaluació i seguiment de protocols de calibratge i verificació d'instruments: cromatògrafs.
- Inferència i descriptiva en la validació de procediments d'anàlisi químic mediambiental, industrial, alimentari i sanitari.
- Equació d'Horwitz, funció incertesa i criteris d'identificació.
- Caracterització de resultats analítics obtinguts en procediments d'anàlisi mediambiental, industrial, alimentari i sanitari.

2. Tècniques d'anàlisi multivariant

Anàlisi explorador de dades mediambientals per mitjà de PCA.
Caracterització de la qualitat de l'aigua potable per mitjà de PCA
Caracterització de la qualitat de l'aigua de platja per mitjà de PCA
Identificació de frauds alimentaris per mitjà de PLS
Anàlisi multicomponent (Ca, Mg) en aigua potable per mitjà de PLS2
Estimació anticipada d'un anàlit en funció d'altres per mitjà de PLS

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Pràctiques en laboratori	20,00	100
Elaboració de treballs individuals	6,00	0
Estudi i treball autònom	12,00	0
Lectures de material complementari	6,00	0
Preparació d'activitats d'avaluació	6,00	0
TOTAL	50,00	

METODOLOGIA DOCENT

Activitats presencials

Les classes de laboratori s'iniciaran amb **seminaris** en què el professor realitzarà una xicoteta introducció de l'objectiu, fonaments i metodologia experimental de les pràctiques a realitzar.



El professor realitzarà en el laboratori les **explicacions** necessàries sobre el funcionament dels instruments a utilitzar en cada pràctica prèviament al seu ús per part dels estudiants i **tutelarà** el seu ús durant la realització de les pràctiques, per a reforçar els coneixements sobre les tècniques empleades.

Els estudiants **realitzaran les pràctiques**, seguint els **protocols o guions de pràctiques** de què disposaran i que podran ser més o menys oberts en funció de cada pràctica i dels objectius específics a adquirir en cada assignatura.

Les **activitats presencials** realitzades en el laboratori formaran part de **l'avaluació contínua** de l'estudiant (Activitats formatives del verifica AF2 i Metodologia docent del verifica MD1).

Es realitzaran **exàmens escrits** de les diferents assignatures en la data prevista en la **programació de les proves d'avaluació** (Activitats formatives del verifica AF4 y Metodologia docent del verifica MD1)

Les competències adquirides a partir de les activitats presencials són les següents:

- Generals: CG1 y CG3
- Específiques: CE2, CE3, CE4, CE5 i CE67

Activitats no presencials

Els estudiants realitzaran les activitats no presencials sol·licitades pel professor (memòries, informes de les pràctiques, etc.) i les entregaran en la data indicada.

Les competències adquirides a partir de les activitats presencials són les següents:

- Específiques: CE7

AVALUACIÓ

1.-Avaluació contínua de l'estudiant en les classes i seminaris (*assistència participativa, manipulació del material i equips, organització del treball, comprensió i utilització del guió de pràctiques, realització de càlculs, treball en equip, etc.*)

Durant les sessions, centrades en la resolució de casos pràctics, s'avaluarà l'assistència i la participació dels alumnes de forma individual (bé contestant oralment o per escrit a les qüestions plantejades pel professor, bé plantejant preguntes la resposta sigui rellevant per a la resta del grup). Entre altres, aquestes preguntes inclouran el disseny de protocols de treball, la selecció de variables i les eines per al tractament de dades (Competències del verifica CE2, CE3, CE5 i CE6). Les sessions pràctiques es realitzaran en grups de treball (Competència del verifica CG1), i es basarà en el plantejament de dubtes i revisió d'aspectes clau de cara a la correcta planificació de l'examen (sense us del programari).

Competències a avaluar: Específiques: CE2, CE3, CE4, CE5 i CE6

PONDERACIÓ 40



2.-Avaluació de les activitats no presencials (*memòries i/o informes de les pràctiques entregats*)

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.-Exàmens escrits

(*basats en els resultats d'aprenentatge de la matèria i en els objectius específics de la assignatura*)

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

REFERÈNCIES

Bàsiques

- 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.



ADDENDA COVID-19

Aquesta addenda només s'activarà si la situació sanitària ho requereix i previ acord del Consell de Govern

Continguts

Es mantenen els continguts inicialment recollits a la guia docent.

Volum de treball i planificació temporal de la docència

Pel que fa a el volum de treball:

Es mantenen les diferents activitats descrites a la Guia Docent amb la dedicació prevista.

Pel que fa a la planificació temporal de la docència:

no hi ha cap variació respecte al previst inicialment en la guia docent.

Metodologia docent

L'ocupació de les aules d'informàtica serà del 50% respecte a l'ocupació habitual. Si el nombre d'estudiants matriculats supera l'aforament del 50% de l'aula, els estudiants assistiran a l'aula per torns rotatius setmanals (preferentment per ordre alfabètic). No obstant això, el sistema de rotació es fixarà un cop conegudes les dades reals de matrícula, garantint-se, en qualsevol cas, que el percentatge de presencialitat de tots els estudiants matriculats en l'assignatura és el mateix.

La metodologia utilitzada per les classes no presencials serà:

1. De forma síncrona mitjançant les eines de l'aula virtual (Teams, Blackboard...)
2. De forma asíncrona mitjançant powers locutats o altres eines de l'aula virtual
3. Resolució d'exercicis i qüestionaris

Si es produeix un tancament de les instal·lacions per raons sanitàries que afecte total o parcialment a les classes de l'assignatura, aquestes seran substituïdes per sessions no presencials seguint els horaris establerts i utilitzant les eines de l'aula virtual.



Avaluació

Es manté el sistema d'avaluació descrit a la Guia Docent de l'assignatura en la qual s'han especificat les diferents activitats avaluable així com la seva contribució a la qualificació final de l'assignatura.

Si es produeix un tancament de les instal·lacions per raons sanitàries que afecte el desenvolupament d'alguna activitat avaluable presencial de l'assignatura aquesta serà substituïda per una prova de naturalesa similar que es realitzarà en modalitat virtual utilitzant les eines informàtiques llicenciades per la Universitat de València. La contribució de cada activitat avaluable a la qualificació final de l'assignatura romandrà invariable, segons el que estableix aquesta guia.

Bibliografia

Es manté la bibliografia recomanada a la Guia Docent doncs accessible.