

## Máster Interuniversitario en Química Aplicada

### DATOS DE LA ASIGNATURA

Fundamental

Especialidad

**Denominación:** Cualimetría y quimiometría aplicada a medioambiente y alimentos

**Código:**

**Plan de Estudios:** Master Interuniversitario en Química Aplicada

**Créditos ECTS:** 4

**Cuatrimestre:** 2º

**Horas de trabajo presencial:**

**Horas de trabajo no presencial:**

**Idioma en que se imparte:**

**Plataforma virtual:**

### RESULTADOS DE APRENDIZAJE

El alumnado,

- Será capaz de validar un método de análisis y de hacer una estimación de la incertidumbre en etapas analíticas unitarias y en un proceso analítico completo.
- Conocerá los fundamentos de quimiometría necesarios para obtener información analítica de calidad.
- Será capaz de extraer información útil a partir de datos experimentales.
- Será capaz de aplicar herramientas de análisis exploratorio, clasificación y regresión multivariable.
- Será capaz de interpretar los resultados obtenidos de la aplicación de tratamiento avanzado de datos.
- Será capaz de realizar informes de resultados adecuados a los requisitos establecidos en el análisis.

### CONTENIDOS

- La Calidad en los laboratorios analíticos: metrología en Química.
- Validación de métodos analíticos, propiedades analíticas y metrológicas. Trazabilidad.
- Incertidumbre en las medidas y resultados analíticos. Referencias analíticas.
- Actividades de control interno de la calidad en el laboratorio analítico.
- Quimiometría: definición y evolución. La matriz objetos-variables.
- Exploración de datos experimentales.
- Tratamientos de preprocesado de datos experimentales.

- Análisis de componentes principales.
- Técnicas de clasificación supervisadas y no supervisadas.
- Calibración y regresión multivariantes.

### OBSERVACIONES

En esta asignatura se potenciará el uso de datos experimentales reales obtenidos por el alumnado (en sus trabajos experimentales previos) o proporcionados por el profesorado.

Se hará especial énfasis en la importancia de estos tratamientos en el análisis de datos obtenidos en los campos de Medio Ambiente y Alimentos.

Todos los contenidos teórico-prácticos estarán disponibles a través de plataformas virtuales.

Las competencias específicas de esta materia son:

CEM1: Interpretar, evaluar y sintetizar datos e información química.

CEM2: Conocer y aplicar los métodos matemáticos y estadísticos para validar métodos de análisis a partir de datos experimentales.

CEM3: Capacidad para elegir la técnica quimiométrica apropiada al tipo de datos y al objetivo del análisis.

CEM4: Utilizar las principales herramientas para el análisis de datos experimentales incluyendo técnicas multivariantes de clasificación y regresión en problemas analíticos, especialmente en los campos de medio ambiente y alimentos.

### COMPETENCIAS

#### Competencias Básicas y Generales:

Código	Competencia
<b>CG2</b>	Que los estudiantes desarrollen su capacidad para alcanzar la excelencia en el trabajo que realicen en las distintas áreas de la Química.
<b>CG3</b>	Que los estudiantes sean capaces de adoptar decisiones de forma eficaz en el desarrollo de su labor investigadora y/o profesional en cualquier campo de la Química Básica y/o Aplicada.
<b>CB9</b>	Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.

#### Competencias Transversales:

Código	Competencia
CT2	Que el estudiante sepa utilizar herramientas de información y comunicación que permitan plantear y resolver problemas nuevos dentro de contextos relacionados con su área de estudio

#### Competencias Específicas:

### ACTIVIDADES FORMATIVAS

Clases teóricas	15	100
Seminarios	13	100
Tutorías en grupo	2	100
Trabajo no presencial	70	

### METODOLOGÍAS DOCENTES

Actividades presenciales (dirigidas y/o supervisadas)

- Clases expositivas: se trabajará en gran grupo sobre los contenidos de la asignatura exponiendo ejemplos que faciliten la comprensión.
- Seminarios: se realizarán ejercicios de aplicación y resolución de casos

Actividades no presenciales

- Elaboración de trabajos sobre estudios de casos y presentación oral de resultados
- Análisis crítico de artículos científicos relacionados con los contenidos de la asignatura

### SISTEMAS DE EVALUACIÓN

Sistema de Evaluación	Ponderación Mínima	Ponderación Máxima
Evaluación continua	30	70
Examen final	30	70

### BIBLIOGRAFÍA

Chemometrics: Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry, 2016, 3rd Edition, Wiley, Matthias Otto, ISBN: 978-3-527-34097-2

Statistics and chemometrics for analytical chemistry, 2018, 7th Edition, Pearson Higher Education, James Miller and Jane C Miller, ISBN-13: 9781292186719

Chemometrics in spectroscopy, 2007, Academic Press, M. Howard. ISBN: 978-0-12-374024-3

Chemometrics in Food Chemistry, Vol. 28. Data Handling in Science and Technology, 2013, 3<sup>rd</sup> Edition, Elsevier, F. Marini, ISBN: 978-0-444-59528-7

Environmental Chemometrics: Principles and Modern Applications, 2008, 1st Edition, CRC Press, Grady Hanrahan, ISBN 9781420067965

Eurachem/CITAC Guide: Guide to Quality in Analytical Chemistry: An Aid to Accreditation (3rd ed. 2016). V. Barwick (Ed), ISBN 978-0-948926-32-7.

Eurachem Guide: The Fitness for Purpose of Analytical Methods – A Laboratory Guide to Method Validation and Related Topics, (2nd ed. 2014). B.Magnusson and U. Örnemark (eds.) ISBN 978-91-87461-59-0.

Eurachem/CITAC guide: Quantifying Uncertainty in Analytical Measurement, Third edition, (2012) S L R Ellison and A Williams (Eds). ISBN 978-0-948926-30-3.