

## **TÍTULO DEL CURSO: DISEÑO Y ANÁLISIS DE EXPERIMENTOS**

**CRÉDITOS: 3**

**PROFESORES:** José María González Sáiz, Consuelo Pizarro Millán, Isabel Esteban

### **OBJETIVOS DE APRENDIZAJE**

- ✓ Concienciar a los alumnos sobre la importancia del diseño de experimentos y su utilidad práctica en el ámbito de la investigación química como herramienta para la calidad en la optimización de procesos.
- ✓ Demostrar, a través de aplicaciones concretas del diseño de experimentos a problemas reales, como un diseño eficiente permite reducir costes, aumentar la eficacia de la experimentación y revelar la naturaleza esencial de un proceso.
- ✓ Investigar la lógica del planteamiento de hipótesis y su verificación, incluyendo el análisis de la varianza y el análisis detallado de datos experimentales.
- ✓ Familiarizar al alumno con la terminología y los principios estadísticos básicos del diseño y análisis de experimentos.
- ✓ Adquirir el conocimiento y las destrezas básicas necesarias para el diseño y análisis de experimentos, centrandó la atención en tres aspectos clave: (1) selección del diseño adecuado; (2) análisis estadístico de los resultados; (3) empleo de paquetes de cálculo estadístico.
- ✓ Detectar y cuantificar los efectos de factores principales y sus interacciones en una o varias respuestas experimentales.
- ✓ Profundizar en los conceptos fundamentales del diseño de experimentos presentando una amplia gama de tipos de diseño: estudio de las propiedades de los diseños básicos y discusión de diseños especiales que responden a objetivos específicos.

- ✓ Adquirir un conocimiento más profundo acerca de cómo se lleva a cabo el análisis e interpretación de datos para el diseño de experimentos utilizando algunos de los paquetes estadísticos más comúnmente empleados.
- ✓ Introducir al alumno en los métodos de optimización para maximizar o minimizar una función objetivo mediante el ajuste de las variables en el modelo del proceso.
- ✓ Comprender el papel de la metodología de superficies de respuesta y sus fundamentos básicos.
- ✓ Avanzar hacia la optimización de propiedades en mezclas complejas a través de diseños experimentales para problemas de mezclas con y sin restricciones.
- ✓ Promover el razonamiento crítico de los resultados obtenidos en la optimización y modelado de distintos sistemas y procesos definidos como casos de estudio.

## **CONTENIDOS DEL CURSO**

### **CAPÍTULO I: Introducción al Análisis de Datos**

#### **Tema 1. INTRODUCCIÓN.**

Conceptos generales. La precisión y la exactitud como criterio. Análisis de la varianza de un factor. Error de la prueba analítica. Error del muestreo químico. Error entre lotes. Diseño jerarquizado. Análisis de la varianza con interacción

### **CAPÍTULO II: Diseño de Experimentos**

#### **Tema 2 INTRODUCCIÓN (FACTORES. ESPACIO EXPERIMENTAL).**

Conceptos generales. Variables independientes; espacio experimental; respuestas. Selección de variables importantes. Optimización. Método "una variable cada vez".

#### **Tema 3 MODELOS COMO HERRAMIENTAS**

Modelos cuantitativos. Expresiones de la variable respuesta. Aspectos iniciales en el modelado de datos experimentales. Modelado. Significación de los parámetros estimados del modelo.

#### **Tema 4 DISEÑOS FACTORIALES A DOS NIVELES.**

Introducción; planteamiento del problema; aleatorización. Diseños factoriales: análisis, interpretación geométrica, cálculos de los efectos de los factores. Generalización del número de factores.

#### **Tema 5 DISEÑOS FACTORIALES FRACCIONALES .**

Introducción. Construcción de un diseño fraccional. pérdida de información. Separación de efectos confundidos. Experimentación bloques.

#### **Tema 6 OTROS DISEÑOS PARA LA SELECCIÓN DE VARIABLES.**

Diseños Plackett-Burman.

### **CAPÍTULO III: Optimización**

Tema 7 MAXIMA PENDIENTE EN ASCENSO.

Principios; dirección. Ventajas y desventajas.

Tema 8 SIMPLEX.

El simplex como técnica secuencial. Principios; variables. Simplex modificado.

Tema 9 MÉTODO DE SUPERFICIES DE RESPUESTAS.

Estrategia paso a paso. Validación del modelo. Condiciones óptimas.

Visualización mediante proyecciones. Diseños para modelos cuadráticos.

Optimización para mas de una variable respuesta.

Tema 10 ALGORITMOS DE INTERCAMBIO

Introducción. Propiedades fundamentales. Ejemplos.

### **CAPÍTULO IV: Otros diseños**

Tema 11. DISEÑO DE MEZCLAS.

Diseño de mezclas sin restricciones. Diseño de mezclas con restricciones.

Modelos alternativos. Problemas que involucran diseños de mezclas.

## METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA APRENDIZAJE

La enseñanza en los programas de formación de nuevos doctores posibilita la adopción de una metodología de enseñanza-aprendizaje centrada, principalmente, en el alumno gracias, por un lado, al reducido número de alumnos por grupo (lo cual permite una mayor dedicación y disponibilidad por parte del profesorado) y, por otro lado, al grado de madurez académica previamente adquirido por los alumnos (lo que afecta de forma muy positiva a su actitud, interés y grado de implicación).

La metodología docente específica a seguir durante la impartición del curso 'Diseño y Análisis de Experimentos' se ajusta, en líneas generales, a los siguientes puntos:

- Los conocimientos correspondientes a la parte teórica del curso se transmitirán mediante clases magistrales de presentación y explicación de los diversos temas contenidos en el programa (apoyadas mediante medios audiovisuales como transparencias, presentaciones con *Power Point* o simulaciones por ordenador), potenciando en todo momento la discusión y participación de los alumnos, estimulándoles a compartir sus apreciaciones, sugerencias y/o críticas de forma interactiva.
- Al tratarse de un curso teórico-práctico, se concede gran importancia a la capacidad para la resolución de problemas, mediante el uso, en aulas informáticas de la Facultad, de paquetes de cálculo estadístico apropiados de acuerdo a los objetivos marcados (NemrodW, SPSS, Statistica, Statgraphics), sin descuidar los conceptos, hipótesis y fundamentos en los que se basan las metodologías de diseño de experimentos y optimización que se aplican.
- Al finalizar cada uno de los bloques de contenidos, se propondrán diversas actividades de refuerzo (seminarios; tutorías; planteamiento de problemas de diseño y optimización para su resolución, debate y puesta en común), con el fin de afianzar la comprensión de los fundamentos teóricos y asegurar su correcta aplicación de cara a problemas prácticos.

## **CRITERIOS DE EVALUACIÓN**

Si bien el reducido número de alumnos permite llevar a cabo un seguimiento y evaluación continuos, en la calificación final del curso se tendrán en cuenta los siguientes aspectos:

- Participación activa y aportación en las clases, tanto teóricas como prácticas, y actitud innovadora y crítica de cara al planteamiento de problemas reales (30%).
- Participación en seminarios, tutorías y otras actividades (20%).
- Resolución y exposición de casos prácticos (25%).
- Pruebas individuales de evaluación de carácter teórico-práctico (25%).

## BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- G.E.P. BOX, N.R. DRAPER. *“Empirical model-building and response surfaces”*. John Wiley & Sons. 1987.
- D.L. MASSART, B.G.M. VANDEGISTE, S.N. DEMING. *“Chemometrics: a textbook”*. Elsevier. 1988.
- G.E.P. BOX, W.G. HUNTER, J.S. HUNTER. *“Estadística para Investigadores. Introducción al diseño de experimentos, Análisis de datos y construcción de modelos”*. Reverté. 1989.
- J.A. Cornell. *“Experiments with mixtures”*. John Wiley & Sons. 1990.
- C.M CUADRAS. *“Métodos de Análisis Multivariante”*. 2ª Ed. PPU, Barcelona, 1991.
- M. MELOUN, J. MILITKY, M. FORINA. *“Chemometrics for Analytical Chemistry”*. Ellis Horwood. 1992.
- R. CARLSON. *“Design and Optimization in Organic Synthesis”*. Elsevier. 1992.
- WALPOLE, MYERS. *“Probabilidad y estadística”*. 4ª Ed.. Mc Graw-Hill. 1992
- J. MILLER, J. MILLER. *“Estadística para Química Analítica”*. Addison-Wesley Iberoamericana. 1993.
- R.H. MYERS, D.C. MONTGOMERY. *“Response surface methodology. Process and product optimization using designed experiments”*. John Wiley & Sons. 1995.
- D.C. MONTGOMERY. *“Design and analysis of experiments, 4th Edition”*. John Wiley & Sons. 1997.
- G. LEWIS, D. MATHIEU, R. PHAN-TAN-LUU. *“Pharmaceutical Experimental Design”*. Marcel Decker. 2000.
- D. MATHIEU, J. NONY, R. PHAN-TAN-LUU. *NemrodW, Version 2000-D*, LPRAI, Marseille, France. <http://www.nemrodw.com>.