

Diseño y análisis de experimentos

GUÍA DOCENTE

Curso 2011-2012

Titulación:	Máster en Química Avanzada	Código	755M		
Asignatura:	Diseño y análisis de experimentos	Código	755310000		
Materia:					
Módulo:	Optativo				
Semestre:	1º				
Créditos ECTS:	3	Horas presenciales:	30	Horas de trabajo autónomo estimadas:	45
Idiomas en los que se imparte:	Español				
Idiomas del material de lectura o audiovisual:	Español, inglés y francés				

Departamentos responsables de la docencia:

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA					Código	112
Dirección:	C/ Madre de Dios 51				Código postal:	26006
Teléfono:	941 299620	Fax:	941 299621	Correo electrónico:	dpto.quimicas@unirioja.es	

Profesores

Profesor responsable de la asignatura:	José María González Sáiz					
Teléfono:	941 299634	Correo electrónico:	josemaria.gonzalez@unirioja.es			
Despacho:	1118	Edificio:	CCT			
Horario de tutorías:	Lunes, martes y miércoles de 11:00 a 13:00.					
Nombre profesor:	Consuelo Pizarro Millán					
Teléfono:	941 299626	Correo electrónico:	consuelo.pizarro@unirioja.es			
Despacho:	1109	Edificio:	CCT			
Horario de tutorías:	Martes y miércoles de 9:30 a 12:30.					
Nombre profesor:	Isabel Esteban Díez					
Teléfono:	941 29935	Correo electrónico:	isabel.esteban@unirioja.es			
Despacho:	1119	Edificio:	CCT			
Horario de tutorías:	Lunes, martes y miércoles de 10:30 a 12:30					

Descripción de contenidos:

- Factores, espacio experimental, los modelos como herramientas, etc.
- Diseños factoriales a dos niveles
- Diseños factoriales fraccionales
- Diseños para la sección de variables
- Maxima pendiente en ascenso.
- Simplex
- Método de superficies de respuestas
- Algoritmos de intercambio
- Diseño de mezclas

Requisitos previos:

Se aconseja conocer fundamentos de Estadística y Quimiometría

PROGRAMA GENERAL

Contexto:

Esta asignatura proporciona al alumno conocimientos y habilidades que le permitirán ser capaz desarrollar una metodología basada en herramientas matemáticas y estadísticas cuyo objetivo es ayudarlo en la selección de la estrategia experimental óptima, permitiéndole, además, evaluar los resultados experimentales obtenidos y garantizando la máxima fiabilidad en las conclusiones finales que se obtengan. Estos conocimientos y habilidades constituyen un punto de partida para la realización del trabajo fin de master y en su caso la tesis doctoral, particularmente en cualquiera de las áreas de la Química.

Competencias:

- Comprender la necesidad de aplicar el Diseño estadístico de Experimentos en la planificación de la experimentación.
- Demostrar conocimiento y comprensión de la metodología del diseño de experimentos y las distintas etapas implicadas en su aplicación práctica.
- Conocer los principales tipos de diseños experimentales clásicos, sus propiedades, objetivos y adecuación en función del problema
- Familiarizarse con la aplicación (a nivel de usuario) de herramientas estadísticas de cálculo al diseño de experimentos.
- Comprender la importancia y necesidad de “diseñar calidad” en lugar de limitarse a verificarla.

Resultados del aprendizaje:

- Dominar las herramientas básicas de análisis estadístico para poder obtener conclusiones válidas.
- Adquirir criterios y herramientas de diseño experimental para planificar la experimentación eficazmente según los objetivos buscados.
- Enfrentar la comprensión de un problema analítico y definir claramente su objetivo.
- Identificar los factores que potencialmente podrían influir en la función objetivo y el dominio experimental de interés.
- Planificar la experimentación, seleccionando el tipo de diseño más adecuado en cada caso.
- Ser capaz de ejecutar un plan de experimentación previamente optimizado, y de interpretar los resultados una vez llevada a cabo la experimentación.
- Desarrollar el razonamiento crítico respecto a la planificación y valoración de resultados como medio para reforzar la confianza del investigador, su capacidad de reacción y de argumentación.
- Desarrollar la capacidad de análisis, de síntesis, de organización y de adaptación a nuevas

situaciones y condiciones de operación.

Temario:

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 SECCIÓN 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 más de una variable respuesta.
- Tema 10 ALGORITMOS GENÉTICOS
Introducción. Propiedades fundamentales. Ejemplos.
- Tema 11 ALGORITMOS DE INTERCAMBIO.
Introducción. Propiedades fundamentales. Ejemplos.

Capítulo IV: Otros diseños.

- Tema 12. DISEÑO DE MEZCLAS.
Diseño de mezclas sin restricciones. Diseño de mezclas con restricciones. Modelos alternativos. Problemas que involucran diseños de mezclas.

Bibliografía:

Libros básicos:

- WALPOLE Y MYERS. "Probabilidad y estadística". 4ª Ed.. Mc Graw-Hill. 1992
- J. MILLER Y J. MILLER. "Estadística y Quimiometría para Química Analítica". Prentice Hall.

2002.

- M. MELOUN, J. MILITKY & M. FORINA. "Chemometrics for Analytical Chemistry". Ellis Horwood. 1992.

Se trata de tres libros de estadística y quimiometría de carácter general, enfocados fundamentalmente hacia una estadística aplicada a la química. Estos libros sentarán la base estadística necesaria a lo largo de los primeros temas de la asignatura.

Monografías especializadas:

- G.A. Lewis, D. Mathieu, R. Phan-Tan-Luu. "Pharmaceutical Experimental Design". Marcel Dekker, Inc, New York, 1999.
- Nemrod-W version 2001 by Didier Mathieu, Jean Nony and Roger Phan-Tan-Luu, LPRAI, Marseille, France. User's manual.
- G.E.P. BOX, W.G. HUNTER y J.S. HUNTER. "Estadística para Investigadores. Introducción al diseño de experimentos, Análisis de datos y construcción de modelos". Reverté. 1989.
- G.E.P. BOX, N.R. DRAPER. "Empirical model-building and response surfaces". John Wiley & Sons. 1987.
- R. CARLSON. "Design and Optimization in Organic Synthesis". Elsevier. 1992.
- C.M CUADRAS. "Métodos de Análisis Multivariante". 2ª Ed. PPU, Barcelona, 1991.
- D.L. MASSART, B.G.M. VANDEGISTE, S.N. DEMING. "Chemometrics: a textbook". Elsevier. 1988.

Estos siete libros que se recomiendan son específicos sobre el diseño de experimentos y abarcan tanto los aspectos teóricos como prácticos. Incluyen una colección importante de ejemplos prácticos en unos de los campos de aplicación más importantes para un químico como son la síntesis química y farmacéutica

Otro material bibliográfico (disponible en la página web de la biblioteca de la UR):

- SCOPUS
- Revistas científicas de Quimiometría

Metodología

Modalidades organizativas:	Métodos de enseñanza:
<ul style="list-style-type: none">- MO1: Clases teóricas- MO2: Seminarios y talleres- MO3: Clases prácticas- MO5: Tutorías- MO6: Estudio y trabajo en grupo- MO7: Estudio y trabajo autónomo del alumno	<ul style="list-style-type: none">- ME1: Lección magistral- ME3: Resolución de ejercicios y problemas

Organización

Actividades presenciales:	Horas
<ul style="list-style-type: none">- Clases teóricas	13
<ul style="list-style-type: none">- Clases prácticas de aula	12
<ul style="list-style-type: none">- Pruebas presenciales de evaluación	2
<ul style="list-style-type: none">- Otras actividades	3

Total horas presenciales

30

Actividades no presenciales (trabajo autónomo):	Horas estimadas
- Estudio autónomo individual o en grupo	20
- Resolución individual de ejercicios, cuestiones u otros trabajos, actividades en biblioteca o similar	10
- Preparación de las prácticas y elaboración de cuaderno de prácticas	5
- Preparación en grupo de trabajos, presentaciones (orales, debates,...), actividades en biblioteca o similar	10

Total horas estimadas de trabajo autónomo

45

Total horas

75

Evaluación

Sistemas de evaluación:	% sobre total	Recuperable/ No Recuperable
- SE1: Pruebas escritas	30	Recuperable
- SE3: Trabajos y proyectos	15	Recuperable
- SE4: Informes/memorias de prácticas	5	Recuperable
- SE5: Pruebas de ejecución de tareas reales y/o simuladas	5	Recuperable.
- SE6: Sistemas de Autoevaluación	20	No Recuper.
- SE7: Escalas de actitudes	5	No Recuper.
- SE9: Portafolio	20	Recuperable

Criterios críticos para superar la asignatura:

- Calificación media en las pruebas escritas y autoevaluaciones ≥ 5 (sobre 10)
- Presentación obligatoria del portafolios y de los trabajos y proyectos
- Asistencia a las sesiones presenciales $\geq 70\%$

Estudiantes a tiempo parcial:

Para los estudiantes a tiempo parcial (reconocidos como tales por la Universidad), las actividades de evaluación no recuperable podrán ser sustituidas por otras, a especificar en cada caso. Esta posibilidad se habilitará siempre y cuando la causa que le impida la realización de la actividad de evaluación programada sea la que ha llevado al reconocimiento de la dedicación a tiempo parcial.