



GUÍA DOCENTE 2022-2023

Control y garantía de calidad de procedimientos, procesos y productos

1. Denominación de la asignatura:

Control y garantía de calidad de procedimientos, procesos y productos

Titulación

Máster Universitario en Química Avanzada

Código

7480

2. Departamento(s) responsable(s) de la asignatura:

Departamento de Química, Departamento de Matemáticas y Computación

3.a Profesor que imparte la docencia (Si fuese impartida por mas de uno/a incluir todos/as) :

Ana Herrero, Silvia Sanllorente, M.^a Sagrario Sánchez

3.b Coordinador de la asignatura

ANA HERRERO GUTIÉRREZ

4. Curso y semestre en el que se imparte la asignatura:

Primer semestre

5. Tipo de la asignatura: (Básica, obligatoria u optativa)

Optativa

6. Requisitos de formación previos para cursar la asignatura:

Se recomienda tener conocimientos de estadística básica, así como conocimientos básicos de procedimientos de análisis químico y de técnicas instrumentales



7. Número de créditos ECTS de la asignatura:

5

8. Competencias que debe adquirir el alumno/a al cursar la asignatura

COMPETENCIAS BÁSICAS Y GENERALES

BÁSICAS

CB6.- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación

CB7.- Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio

CB8.- Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios

CB9.- 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

CB10.- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

GENERALES

CG1.- Tener capacidad para organizar, planificar y ejecutar una idea o proyecto

CG2.- Tener conocimientos de informática relativos al ámbito de estudio incluyendo las habilidades básicas en Tecnologías de la Información y Comunicación

CG5.- Tener habilidades en las relaciones interpersonales, demostrando iniciativa, liderazgo y motivación por la calidad, de modo que pueda desarrollar trabajos en equipo

CG6.- Poseer la capacidad de gestionar, evaluar, interpretar, sintetizar y transmitir adecuadamente la información relativa al ámbito de estudio

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS (según la memoria del título)

CE1 - Haber adquirido conocimientos avanzados de Química demostrando, en un contexto altamente especializado, una comprensión detallada y fundamentada de los aspectos teóricos y prácticos y de la metodología de trabajo en Química.

CE3.- Poseer habilidades que permitan interpretar y usar la información química



proporcionada por las técnicas instrumentales más avanzadas para resolver problemas en el ámbito industrial, en la regulación legal y/o en el estudio de nuevos materiales.

CE4 - Ser capaces de predecir y controlar la evolución de situaciones complejas en Química mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo.

CE6.- Haber desarrollado la autonomía suficiente para participar en proyectos relacionados con la Química, en contextos interdisciplinares y, en su caso, con una alta componente de transferencia del conocimiento

CE7.- Poseer habilidades en el manejo de herramientas informáticas avanzadas que se utilizan en el ámbito de la Química.

9. Programa de la asignatura

9.1- Objetivos docentes
1. Comprender la necesidad de una metodología objetiva para controlar un procedimiento, un proceso o un producto. 2. Conocer la metodología estadística para validar una medida y/o un efecto. 3. Comprender la metodología robusta, su necesidad y utilidad. 4. Conocer las cartas de control, univariantes o multivariantes, su significado, validación y uso. 5. Saber dar la certidumbre en una medida analítica. 6. Comparar resultados en un rango de concentraciones. 7. Manejar intervalos y test de hipótesis paramétricos y no paramétricos. 8. Manejar la metodología de un ANOVA para establecer efectos significativos en los factores tanto si son fijos como aleatorios y ANOVAS encajados. 9. Descomponer la variabilidad total de un proceso en la suma de sus componentes. 10. Determinar tamaños muestrales adecuados para potencias de los test prefijadas. 11. Detectar datos anómalos mediante las técnicas robustas apropiadas tanto en ensayos interlaboratorio como en técnicas de regresión. 12. Determinar la repetibilidad y reproducibilidad de un procedimiento. 13. Construir el modelo de calibrado señal en función de la concentración para todo tipo de instrumentación analítica. 14. Estimar la matriz de covarianzas para las cartas multivariantes basadas en la T^2 de Hotelling. 15. Manejar las curvas operativas de las cartas de control basadas en distintas distribuciones de probabilidad. 16. Manejar las distribuciones de Poisson, normal y binomial. 17. Construir cartas de control fijando los límites AQL, LQ, AOQL o por selección de la curva característica. 18. Calcular la curva operativa de un plan de muestreo de aceptación prefijado. 19. Estudiar heterogeneidad en lotes.



9.2- Unidades docentes (Bloques de contenidos)

Acreditación de laboratorios de ensayo y calibración (LECs)

TEMA 1

Criterios generales de acreditación de los laboratorios de ensayo y calibración (LECs) según normas ISO, EN, UNE. Política y garantía de calidad: Sistemas de calidad. Evaluación y control de la calidad: Auditorías, comparación de resultados, muestras de control. Conceptos de acreditación, certificación y homologación. Tipos de ensayos comparativos: ensayos de aptitud, estudios colaborativos, estudios de certificación.

Validación de las medidas químicas

2. Metrología de la medida química

Modelo de medida en química analítica. El efecto de los datos anómalos sobre algunas figuras de mérito en la validación analítica. Punto de vista de algunas normativas e instituciones: ISO, EN, UNE, AOAC, IUPAC, etc. Análisis descriptivo de datos analíticos: necesidad de utilizar estadísticos no paramétricos y/o robustos y sus estimaciones. Cálculo de z-scores, scores robustos.

3. Intervalos de tolerancia, de confianza y test de hipótesis

Comparación de dos procedimientos de análisis en precisión y exactitud cuando hay datos anómalos. Test paramétricos frente a los no paramétricos y/o robustos, eficiencia. Intervalos mediante bootstrap. Intervalos de beta-tolerancia.

4. Análisis de la varianza

Cálculo de la potencia del ANOVA y tamaños muestrales. El problema de los datos anómalos, tests de Dixon y Grubbs, test de Kruskal Wallis. Estimaciones robustas de repetibilidad y reproducibilidad en el contexto de la ISO-5725. Contrastes de múltiples medias.

5. Alternativas a la regresión por mínimos cuadrados

Regresiones robustas. Detección de datos anómalos en regresiones univariantes y multivariantes. Capacidad de detección según la normativa ISO-11843 y IUPAC basadas en calibrados. Riesgo de falso positivo y falso negativo. Comparación de dos o más pendientes de calibrado.

6. Control de residuos tóxicos o prohibidos

Características de funcionamiento de los métodos cualitativos y cuantitativos. Criterios de funcionamiento para sustancias prohibidas y con límites máximos de residuos según las normativas europeas. Probabilidad de falsa no conformidad y falsa conformidad. Evaluación del límite de detección, $CC\alpha$, y de la capacidad de detección, $CC\beta$. Criterios de identificación mínimos para sustancias prohibidas cuando se utilizan técnicas cromatográficas y espectroscópicas.



Control de procesos y productos

7. Control de procesos

Control de procesos por variables. Cartas de control para la media, para la desviación típica y rangos. Cartas de control por atributos, usando una binomial (número de ítems defectuosos, proporciones, porcentajes), o una distribución de Poisson (número de defectos). Diseños de planes de control de proceso por variables y por atributos. Curvas operativas. Análisis de tendencias mediante la media móvil, técnicas acumulativas (Cusum). Metodología robusta en las cartas de control.

8. Capacidad de un proceso

Valores nominales y especificaciones. Estimación de la probabilidad de fuera de especificación. Índices de capacidad bajo hipótesis de normalidad. Intervalos de tolerancia para algunas distribuciones: normal, exponencial, lognormal, Weibull. Tolerancia para distribuciones libres de distribución y/o no paramétricas. Control por atributos: curvas operativas, planes de muestreo múltiples, secuenciales. Indicadores de calidad: Nivel de calidad aceptable (AQL), calidad límite (LQ), calidad media de salida (AQQ).

Análisis multivariante en el control de procesos y productos

TEMA 9

El problema de la correlación entre variables. Cartas de control multivariante basadas en la T^2 de Hotelling. Nuevas tendencias en el control analítico de procesos (PAT).

9.3- Bibliografía

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- B. Neidhart, W. Wegscheider (ed.), (2001) Quality in Chemical Measurements. Training concepts, Springer-Verlag,
- D.C. Montgomery, (2005) Introduction to Statistical Quality Control , 5ed., John Wiley,
- EURACHEM Working Group, (1998) The Fitness for Purpose of Analytical Methods, H. Martens, M. Martens, (2001) Multivariate Analysis of Quality. An introduction, Wiley, Chichester,
- L.A Sarabia, M.S. Sánchez, and M.C. Ortiz, (2008) Introduction to ranking methods. In: Manuela Pavan and Roberto Todeschini, editors, Scientific data ranking methods: Theory and applications. Data Handling in Science and Technology, vol. 27, Elsevier, 978-0-444-53020-2,
- N.R. Draper and H. Smith, (1998) Applied Regression Analysis, 3rd ed., John Wiley, New York,
- S.D. Brown, R. Tauler, R., B. Walczak (Eds), (2020) Comprehensive Chemometrics. Chemical and Biochemical data analysis. 2nd edition, Four-Volume set, Elsevier, Oxford,



BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

EURACHEM, www.eurachem.org.

Association of Analytical Communities, www.aoac.org.

Asociación Española de Normalización y Certificación, www.aenor.es.

International Union of Pure and Applied Chemistry, www.iupac.org.

International Organization for Standardization, www.iso.org.

D.L. Massart, B.G.M. Vandeginste, L.M.C. Buydens, S. de Jong, P.J. Smeyers-Verbeke (Eds.), (1996-1997) Handbook of Chemometrics and Qualimetrics; Part A and Part B. Data Handling in Science and Technology, vol. 20A, 20B, Elsevier, Amsterdam,

ISO 11843, (2000) Capability of detection. Part II: Methodology in the linear calibration case,

ISO 3534-1, (2003) Statistical methods for quality control. Vol. 1: vocabulary and symbols,

ISO 5725, (1994) Accuracy (trueness and precision of measurements methods and results),

L. Sach, (1982) Applied Statistics, Springer-Verlag, New York,

9.4- Acceso a la Bibliografía Recomendada desde Leganto

https://leganto.ubu.es/leganto/public/34BUC_UBU/lists?courseCode=7480&auth=SAML

10. Metodología de enseñanza y aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante:

La asignatura se desarrolla intercalando los fundamentos teóricos y prácticos necesarios para la resolución de problemas, mediante datos reales como casos de estudio y el uso de software profesional específico para los objetivos fijados (Statgraphics y otros).

Una vez comprendidos los fundamentos teóricos y comprobado que se han aplicado correctamente para la resolución del problema propuesto, se hará un debate-puesta en común de los resultados alcanzados, las conclusiones obtenidas y la dirección a seguir, si el problema lo requiere. Esta secuencia de actividades permitirá ir avanzando en la construcción e interiorización del conocimiento propio de la materia.

Búsqueda o generación y análisis adecuado de datos experimentales. Evaluación de los resultados mediante informes individuales escritos que se defenderán ante el resto de alumnos.



Metodología	Competencia relacionada	Horas presenciales	Horas de trabajo	Total de horas
Clases teóricas	CB6, CB10 CE1,CE3, CE4,CE6, CE7	8	16	24
Clases prácticas	CB6, CB7, CG2 CE1,CE3, CE4,CE6, CE7	22	32	54
Seminarios y tutorías	CB6, CB7,CB10 CE1,CE3, CE4,CE6, CE7	4	4	8
Elaboración de trabajos e informes	CB8, CB9, CB10 CG1, CG2, CG5 CE1,CE3, CE4,CE6, CE7	3	12	15
Presentación oral y debate	CB7, CB9 CG6 CE1,CE3, CE4,CE6, CE7	4	8	12
Pruebas escritas individuales	CB7, CB8, CB9 CG6 CE1,CE3, CE4,CE6, CE7	4	8	12
Total		45	80	125

11. Sistemas de evaluación:

La "participación en seminarios, tutorías y otras actividades presenciales", por su propia naturaleza, no es recuperable en segunda convocatoria.

Se requiere un mínimo de 5 sobre 10 para superar la asignatura siendo necesario obtener un mínimo de 4 (sobre 10) en cada procedimiento, excepto la "participación en seminarios, tutorías y otras actividades presenciales".

El sistema de evaluación para estudiantes de intercambio será modificado en el supuesto de que los calendarios académicos de las universidades de origen y de destino no sean coincidentes

Los estudiantes que fueran sorprendidos copiando o plagiando en cualquiera de los



procedimientos de evaluación de la asignatura tendrán una calificación de cero en la nota global de la asignatura, de acuerdo con el artículo 17.2 del Reglamento de Evaluación de la Universidad de Burgos.

Procedimiento	Peso primera convocatoria	Peso segunda convocatoria
Realización de trabajos y presentación de informes	40 %	40 %
Resolución de ejercicios y casos prácticos	20 %	20 %
Participación en seminarios, tutorías y actividades presenciales	15 %	15 %
Pruebas escritas de carácter individual y presencial	25 %	25 %
Total	100 %	100 %

Evaluación excepcional:

Para aplicar esta modalidad de evaluación es obligatorio la realización de las pruebas presenciales de carácter personal e individual el mismo día y a la misma hora en la que están convocados el resto de los alumnos. Se requiere un mínimo de 5 sobre 10 para superar la asignatura siendo necesario obtener un mínimo de 4 sobre 10 en la evaluación de los siguientes procedimientos:

Prueba de conocimientos mínimos: 40 %

Prueba de habilidades y destrezas en el laboratorio de cómputo: 40 %

Realización y presentación de trabajos de forma oral y/o escrita: 20 %

12. Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial:

Los recursos se irán poniendo a disposición de los estudiantes a lo largo del desarrollo de la materia.

Se mantendrá una atención personalizada durante las horas de tutoría establecidas por cada docente.

13. Calendarios y horarios:

Los que establezca la Facultad, que se encuentran publicados en la hoja Web del título.

14. Idioma en que se imparte:

Español