1. IDENTIFICACIÓN

Materia: HERRAMIENTAS PARA LA

INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA

Carrera: Ingeniería Química

Códigos: SIRE: 6112 EIQ: IQ-ET54

Prelación: IQ-5047 Ubicación: Electiva TPLU: 3-0-2-4

Condición: Electiva Técnica

Departamento: Química Industrial y Aplicada

2. JUSTIFICACIÓN

El estudiante de Ingeniería Química se enfrenta al final de su formación académica con la valiosa oportunidad de realizar el Proyecto de Grado o tesis. Este trabajo además de servirle para fortalecer las cualidades de investigador, le permite profundizar en los conocimientos adquiridos en su carrera, y desempeñarse independientemente en la solución de un problema de aplicación práctica.

Cuando el estudiante se enfrenta al Proyecto de Grado, acaba de aprobar el bloque de cursos básicos para su exitoso desempeño como Ingeniero Químico; pero aún tiene ciertas debilidades en el diseño, ejecución, análisis y registro de los trabajos experimentales. Aunque a lo largo de su formación, aprueba múltiples cursos de laboratorio y un curso de Estadística; el Tutor del Proyecto de Grado debe invertir una gran fracción del tiempo en orientarle acerca de la forma adecuada de planear sus experimentos, y analizar los resultados que ellos se derivan. A esto se suma además la fracción de tiempo que invierte en recordarle los pasos a seguir para escribir un texto científico. Esto resta tiempo al aprendizaje de aquellos conceptos propios de la investigación seleccionada.

El curso "Herramientas para la investigación científica" se presenta como una opción para solventar los problemas descritos con anterioridad. Se plantea como una Electiva Técnica, que al ser opcional, puede ser cursada por cualquier estudiante de los últimos semestres de la carrera de Ingeniería Química; pero que tiene como objetivo principal ofrecer al tesista, las herramientas necesarias para la realización exitosa de su Proyecto de Grado.

El contenido que cubre este curso es variado, y va desde las normas básicas para la redacción y presentación de los resultados de la investigación en el formato de artículo científico; hasta el análisis estadístico de los datos experimentales. Tiene una naturaleza teórico-práctica debido a que el Estudiante se familiarizará con el uso de las herramientas

computacionales disponibles para la elaboración de reportes escritos y gráficas, así como para la aplicación de los tratamientos estadísticos más útiles en el análisis de datos.

Dada su amplia formación para el trabajo experimental, el egresado con Proyecto de Grado en Ingeniería Química es empleado frecuentemente, como investigador o analista de control de calidad en empresas importantes a nivel nacional e internacional. El Proyecto de Grado sirve para fortalecer estas características de su perfil, y se pretende enriquecerlo y fortalecerlo aún más, con el curso que se propone: "Herramientas para la Investigación Científica".

3. REQUERIMIENTOS

Conocimientos impartidos en el curso de Estadística, y en los cursos de Laboratorio de Química Analítica, Laboratorio de Química Orgánica, Laboratorio de Fisicoquímica, Laboratorio de Química Industrial. Conocimientos de métodos numéricos impartidos en la materia Matemáticas Especiales.

4. OBJETIVOS

GENERAL

Proveer al estudiante que cursa el Proyecto de Grado de las herramientas necesarias para la planificación, ejecución, análisis y reporte de su investigación.

ESPECIFICOS

- Lograr que el estudiante maneje con fluidez las principales herramientas para el análisis estadístico de datos provenientes de experimentos en el área de Ingeniería Química
- Profundizar sobre la estructura y variables necesarias para la elaboración de una investigación científica
- Proveer al estudiante de las herramientas que le permitan diseñar los experimentos para resolver un problema en particular.
- Instruir al estudiante en los procedimientos correctos para el análisis estadístico de los datos experimentales de su investigación.
- Profundizar sobre la metodología a seguir para la presentación de su investigación en el formato de artículo científico

5. CONTENIDO PROGRAMÁTICO

CAPITULO 1. EL EXPERIMENTO (5 H)

Experimentos aleatorios y determinísticos. Variable aleatoria continua y discreta. Definición de probabilidad. Teoría de probabilidades. Funciones de distribución continuas y discretas.

Cada estudiante debe de acuerdo a su tópico de proyecto de grado, trabajar en el seguimiento de este proceso:

Selección del problema. Justificación e Impacto de la Investigación. Identificación de las variables a estudiar en el experimento. Estrategias de experimentación. Formulación de hipótesis. Revisión de ejemplos de investigaciones realizadas en las distintas áreas de la Ingeniería Química usando artículos científicos de revistas indizadas.

CAPITULO 2. ERRORES EXPERIMENTALES. CONTROL DE CALIDAD EN LA RECOLECCIÓN PREPARACIÓN Y ANÁLISIS DE MUESTRAS. (5H)

Muestreo Aleatorio y otros tipos de muestreo. Reproducibilidad. Repetitividad. Errores en la medición de variables experimentales. Precisión y Exactitud. Tipos de Errores: Gruesos, Aleatorios y Sistemáticos. Reglas de propagación de errores aleatorios y sistemáticos. Aplicaciones a la preparación de soluciones, análisis de volumetría, gravimetría, potenciometría, conductimetría, cromatografía, espectrometría de luz visible y de absorción atómica; y otras técnicas analíticas de uso común en la Ingeniería Química.

CAPITULO 3. MODELOS EXPLORATORIOS PARA EL ANÁLISIS DE DATOS (5 H)

Estadísticas descriptivas. Medidas de tendencia central: Mediana, trimediana y media. Medidas de dispersión: Desviación absoluta de la mediana vs. Desviación estándar. Medidas de forma: Índice Yule-Kendall vs. Índice de simetría. Cuantiles. Histogramas. Gráficos de caja. Métodos de re-expresión de los datos; transformaciones potenciales, transformaciones estandarizadas. Técnicas de exploración de datos pareados: gráficos de puntos dispersos, correlación de Pearson. Aplicaciones para el análisis de series de datos de procesos ambientales o de respuestas dinámicas de procesos químicos.

CAPITULO 4. PRUEBAS DE CONTRASTE (5 H)

La distribución normal o gaussiana como modelo de distribución de probabilidad continua. Media, varianza y valores esperados. Media muestral y varianza muestral. Grados de Libertad. La distribución t y F. Pruebas de hipótesis. Hipótesis estadísticas. Enfoque del valor de p en la prueba de hipótesis. Comparación de una media experimental con un valor conocido. Comparación de dos medias experimentales. Contraste t de datos emparejados. Comparación entre varianzas muestrales. Contraste de Dixon y Contraste de Grubbs para datos anómalos. Límites de confianza para muestras pequeñas y grandes. Aplicaciones en el área de Ingeniería Química.

El estudiante debe realizar las aplicaciones de los tópicos de este capítulo a los datos provenientes de su proyecto de grado.

CAPITULO 5. EL ANÁLISIS DE VARIANZA Y EL DISEÑO EXPERIMENTAL (10 H)

Análisis de varianza una y más vías. Efectos fijos. Efectos aleatorios. Descomposición de la varianza. Análisis estadístico. Estimación de los parámetros

del modelo. Verificación de la adecuación del modelo: supuesto de normalidad, gráfica de residuales contra valores ajustados. Diseño factorial de dos factores. Diseño general de 2ⁿ. Aplicaciones del diseño factorial al estudio de la influencia de las variables experimentales del tópico investigado por el estudiante en su proyecto de grado.

CAPITULO 6. LA REGRESIÓN COMO HERRAMIENTA PARA DETECTAR ERRORES EN EL ANÁLISIS INSTRUMENTAL (10 H)

Los métodos de calibración y la regresión lineal. Regresión lineal. Errores en la pendiente y ordenada en el origen. Cálculo de una variable y su error a partir de una curva de calibración. Verificación de la adecuación del modelo de regresión lineal a la representación de un sistema determinado. Identificación de datos anómalos en una regresión. Aplicaciones de la regresión lineal a: estimación del Límite de detección de un método analítico, método de la adición de estándar para estimar la concentración de una solución problema, comparación de métodos analíticos. Intersección de modelos de regresión para la determinación de variables en experimentos analíticos: uso en la estimación del punto final de una titulación, estimación de la concentración micelar crítica. Aplicaciones en la búsqueda de ecuaciones de sintonización de controladores, curvas de calibración de bombas, rotámetros, etc. El estudiante debe identificar posibles aplicaciones de la regresión lineal a su tópico de estudio en el proyecto de grado.

CAPITULO 7. EL ARTICULO CIENTÍFICO (8 H)

Partes de un artículo científico y naturaleza de la información que presentan. Tipo de lenguaje a usar en un artículo: gramática, puntuación, ortografía. Preparación de figuras y tablas. Referencias. Convenciones de estilo para referencias. Herramientas computacionales para el manejo de referencias (EndNote, Word, etc.) Uso de LaTex y Word para escritura de artículos científicos.

6. METODOLOGÍA.

El contenido teórico del curso será impartido bajo la modalidad de clases en sesiones de tres horas semanales. Cada semana se realizarán sesiones de trabajo práctico de dos horas en el laboratorio de computación para la puesta en práctica de los conceptos impartidos en clases usando las herramientas computacionales disponibles. El número de horas de trabajo es de 48 horas, y se plantea en base a un semestre normal de 16 semanas.

7. RECURSOS.

Pizarra acrílica, marcadores. Computador y video-beam. Paquetes computacionales para la resolución y creación de modelos matemáticos, graficación, almacenamiento de datos, reporte escrito de información y análisis estadístico.

8. **EVALUACIÓN**

- Exámenes teóricos 40% de la nota definitiva
- Exámenes prácticos 40% de la nota definitiva
- Trabajo final 20 % de la nota definitiva

9. BIBLIOGRAFÍA.

Miller, J.C. J. N., Miller . J. "Estadística y Quimiometría para Química Analítica". 4^{ta} ed. Prentice-Hall, España, 2002. ISBN: 13-022888-5

Miller, J.C. J. N., Miller. J. "Estadística para Química Analítica". 2^{da} ed. Addison-Wesley Iberoamericana, EUA, 1988 ISBN: 0-201-60140-0

Montgomery, Douglas "Diseño y Análisis de Experimentos".5^{ta} ed. John Wiley & Sons, Inc. USA, 2001. ISBN: 968-18-6156-6

Dodd, J. (Editor) "The ACS Style Guide: A Manual for Authors and Editors" 2da Ed. An American Chemical Society Publication, USA, 1997. ISBN-10: 0841234620

Coghill, A., Garson. "The ACS Style Guide: Effective Communication of Scientific Information" 3era Ed. An American Chemical Society Publication, USA, 2006. ISBN-10: 0841239991

Wilks, Daniel S. "Statistical Methods in Atmospheric Sciences" Academic Press, UK, 2006 ISBN: 978-0-12-751966-1

10. VIGENCIA

Desde el semestre U-2014