

VI JORNADAS DE EXPERIENCIAS DE INNOVACIÓN DOCENTE DE LA UNIVERSIDAD DE BURGOS

Una experiencia de aprendizaje autónomo en el contexto del Espacio Europeo de Educación Superior

GRUPO INTERDISCIPLINAR DE LA FACULTAD DE
CIENCIAS EN EL GRADO/MASTER EN QUÍMICA

Responsable grupo: María Cruz Ortiz

Sarabia L., Sánchez M.S., Pérez T.,
Hoyuelos, J., Navarro M., Peñacoba I., Ibeas S.



Facultad de Ciencias

Grupo de innovación docente de la Universidad de Burgos:
Grupo Interdisciplinar de la Facultad de Ciencias en el
Grado/Máster en Química (GID-IQFC)



Grupo permanente de trabajo al amparo de la convocatoria de la **Consejería de Educación** de la Junta de Castilla y León, la **ASUCyL** **Agencia para la Calidad del Sistema Universitario de Castilla y León** y la **Universidad de Burgos**

Su actividad de innovación docente ha sido financiada:

2004-05	UB 14/04	2.990 €
2004-05	UB 14/04	2.990 €
2005-06	UB 14/05	10.000 €
2008-09	UBU-2009	3.000 €
2010-11	UBU-2011	600 €



Grupo de innovación (GID-IQFC)

- ✓ Análisis matemático  
- ✓ Electromagnetismo  
- ✓ Estadística e Investigación Operativa  
- ✓ Física Aplicada  
- ✓ Ingeniería Química    
- ✓ Química Analítica          
- ✓ Química Física        
- ✓ Química Inorgánica      
- ✓ Química Orgánica  

20 profesores con docencia en el Grado en Química/Máster

- ✓ 5 departamentos
- ✓ 9 áreas de conocimiento

Implementación de recursos e-learning que integran materiales interdisciplinarios para la adquisición de una competencia específica en Química

Proyecto 2010-2011 (GID-IQFC)

- ✓ Incorporar explícitamente la interdisciplinariedad en diferentes actividades de enseñanza-aprendizaje 'e-learning'
- ✓ Competencia específica: "la espectroscopia molecular en el UV/visible, IR y NIR".
- ✓ Se solicitará al estudiante la inclusión de contenidos vistos en otras disciplinas y su relación explícita con la actividad que actualmente ha de desarrollar.
- ✓ Elaboración de una encuesta para recabar información sobre los puntos fuertes/débiles de esta actividad



Personas

Participantes

Actividades

Recursos

Administración

Calificaciones

Perfil

Actividad reciente

Actividad desde domingo, 13 de junio de 2010, 13:36
[Informe completo de la actividad reciente](#)

Sin novedades desde la última entrada

Personas

Participantes

Diagrama de temas

- logo
- PlantillaWord
- abstract INDOQUIM_2010

- ACTIVIDAD 1: PROPIEDADES DE LA RADIACIÓN ELECTROMAGNÉTICA**
- ACTIVIDAD 2: FUNDAMENTOS ÓPTICOS Y CUÁNTICOS DE LA ESPECTROSCOPIA MOLECULAR**
- ACTIVIDAD 3: EFECTO FOTOELÉCTRICO**
- ACTIVIDAD 4: ESPECTROSCOPIO DE PRISMA Y ESPECTROS DE EMISIÓN**
Espectroscopía de prisma
Documento de la Práctica: Espectroscopía de prisma
- ACTIVIDAD 5: ANÁLISIS DE MODELOS FUNCIONALES A TRAVÉS DE LAS DERIVADAS**
Ecuaciones diferenciales de la cinética química
- ACTIVIDAD 6: FILTRADO Y TRANSFORMACIONES DE SEÑALES**
FiltradoSeñales

Calendario

junio 2010

Lun	Mar	Mié	Jue	Vie	Sáb	Dor
	1	2	3	4	5	6
7	8	9	10	11	12	13
14	15	16	17	18	19	20
21	22	23	24	25	26	27
28	29	30				

Clave de eventos

- Global
- Curso
- Grupo
- Usuario

Eventos próximos

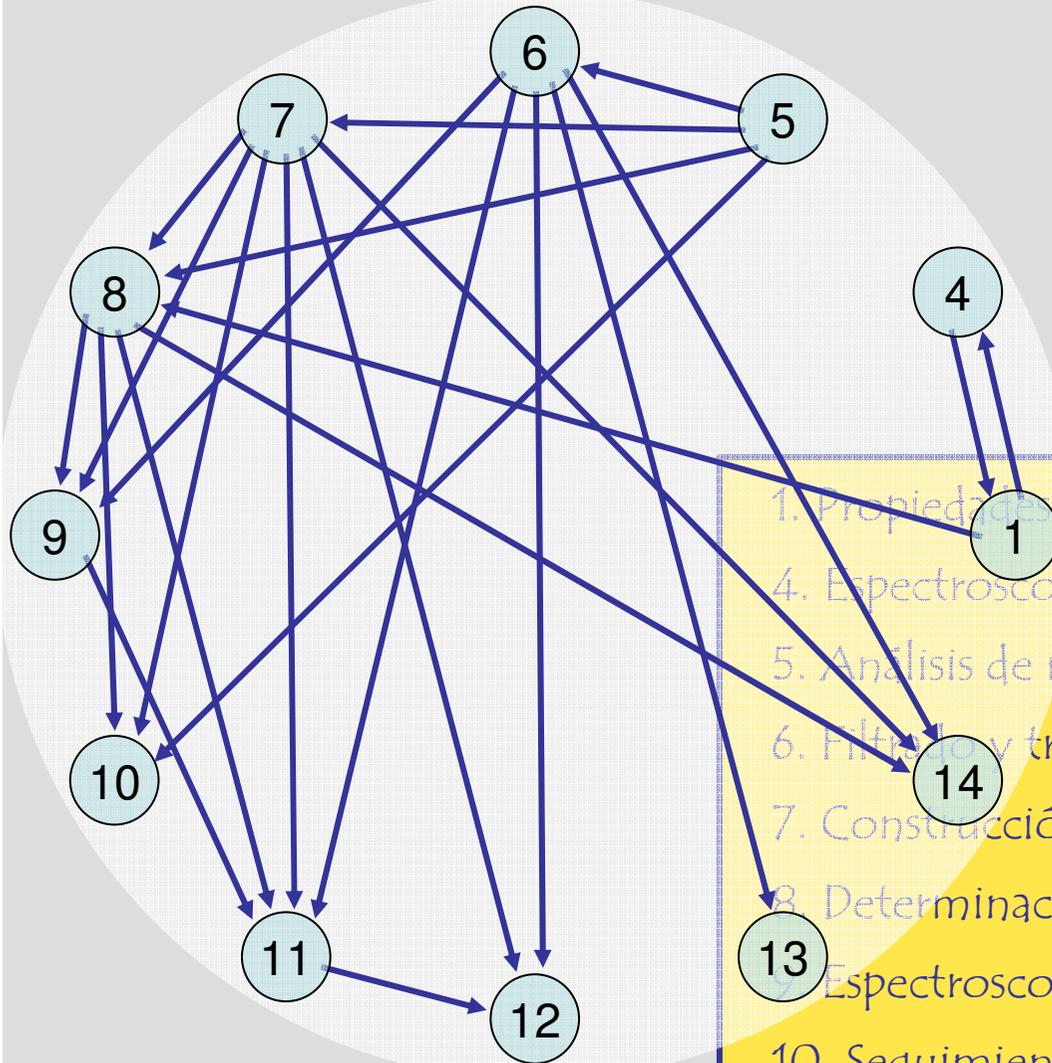
No hay eventos próximos

[Ir al calendario...](#)
[Nuevo evento...](#)

Mensajes

No hay mensajes en espera
[Mensajes...](#)

Vinculación entre las actividades



1. Propiedades de la radiación electromagnética

4. Espectroscopio de prisma y espectros de emisión

5. Análisis de modelos funcionales

6. Filtrado y transformación de señales

7. Construcción y evaluación de modelos de regresión

8. Determinación con señales específicas en el visible

13. Espectroscopia derivada

10. Seguimiento espectrofotométrico de una cinética

11. Cuantificación con señales no específicas en el UV/Vis

12. Determinaciones con señales no específicas en el NIR

13. Elucidación estructural

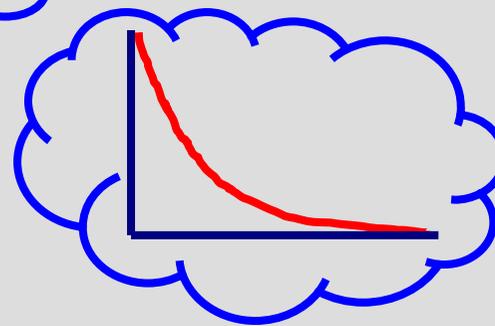
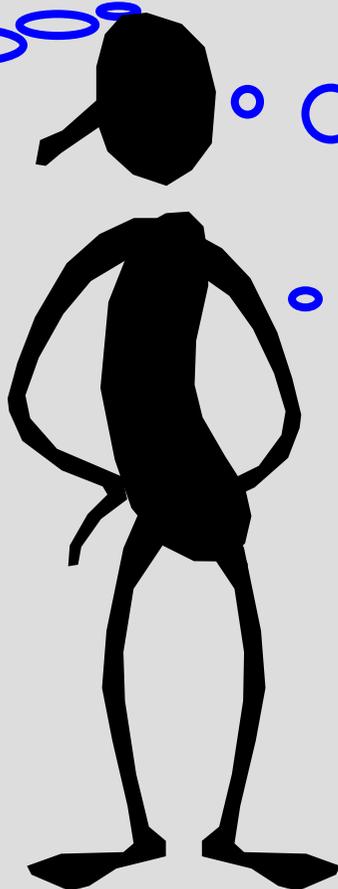
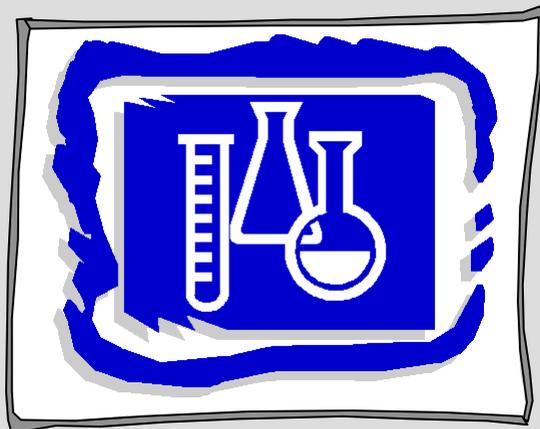
14. Aplicaciones: Extracción de cafeína

1

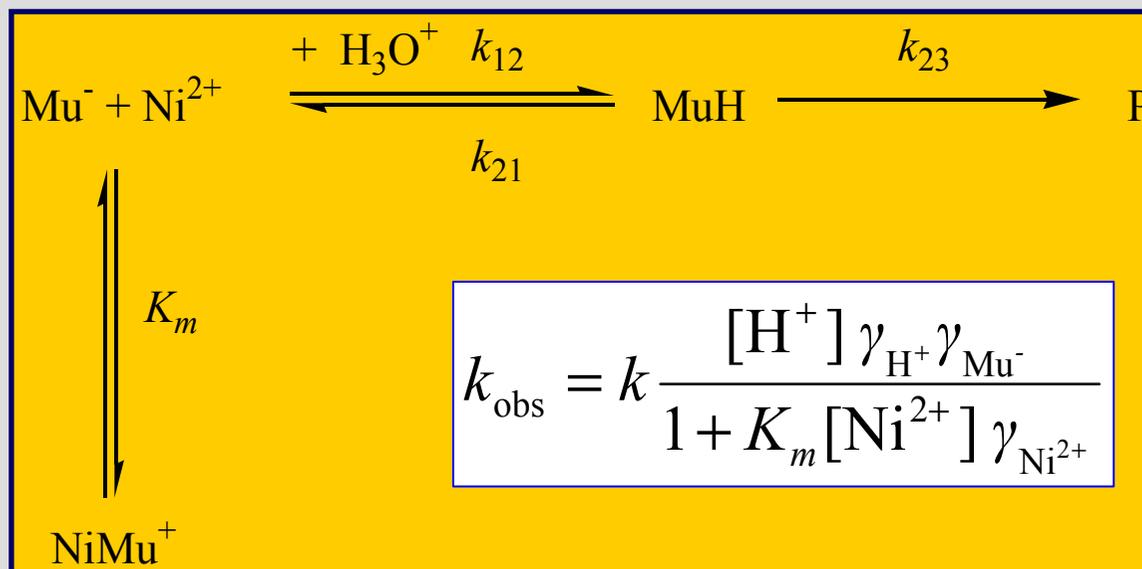
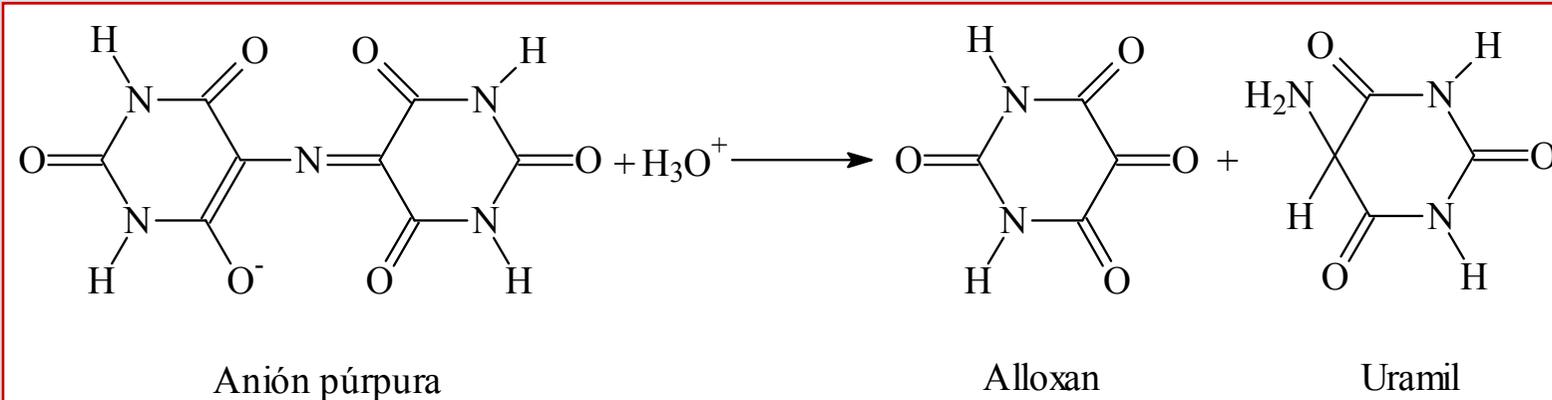
PRÁCTICA (6° semestre)

¿Cómo ajusto un modelo cinético teórico a datos experimentales obtenidos del seguimiento espectrofotométrico en el rango del visible?
¿Qué fiabilidad tengo en la constante de formación del complejo obtenida de los coeficientes del modelo ajustado?

CINÉTICA ; ORDEN? AJUSTE..



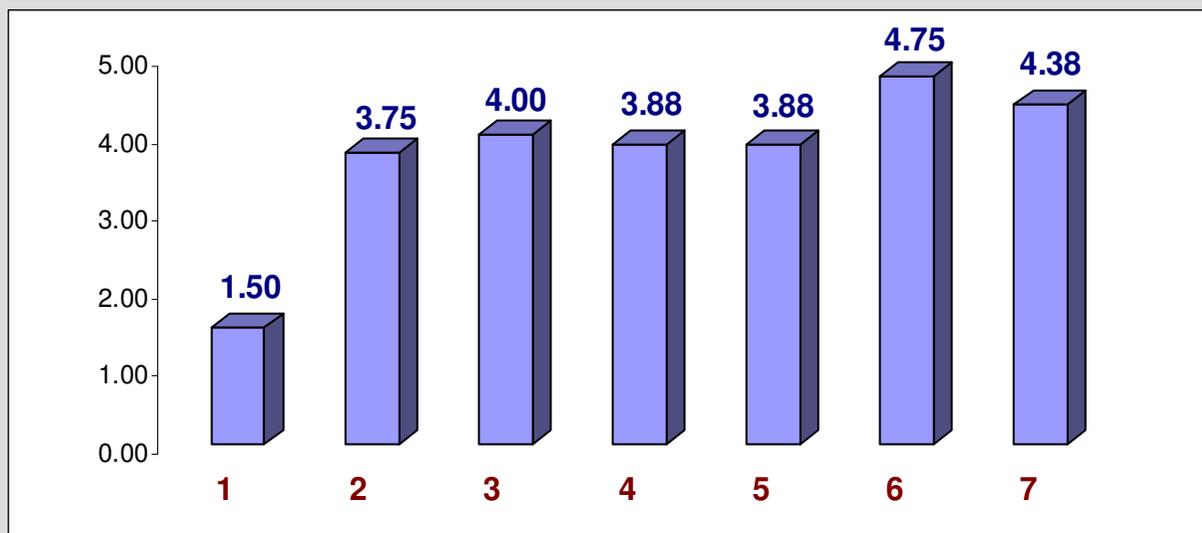
HIDRÓLISIS DE MUREXIDA EN PRESENCIA DE NÍQUEL



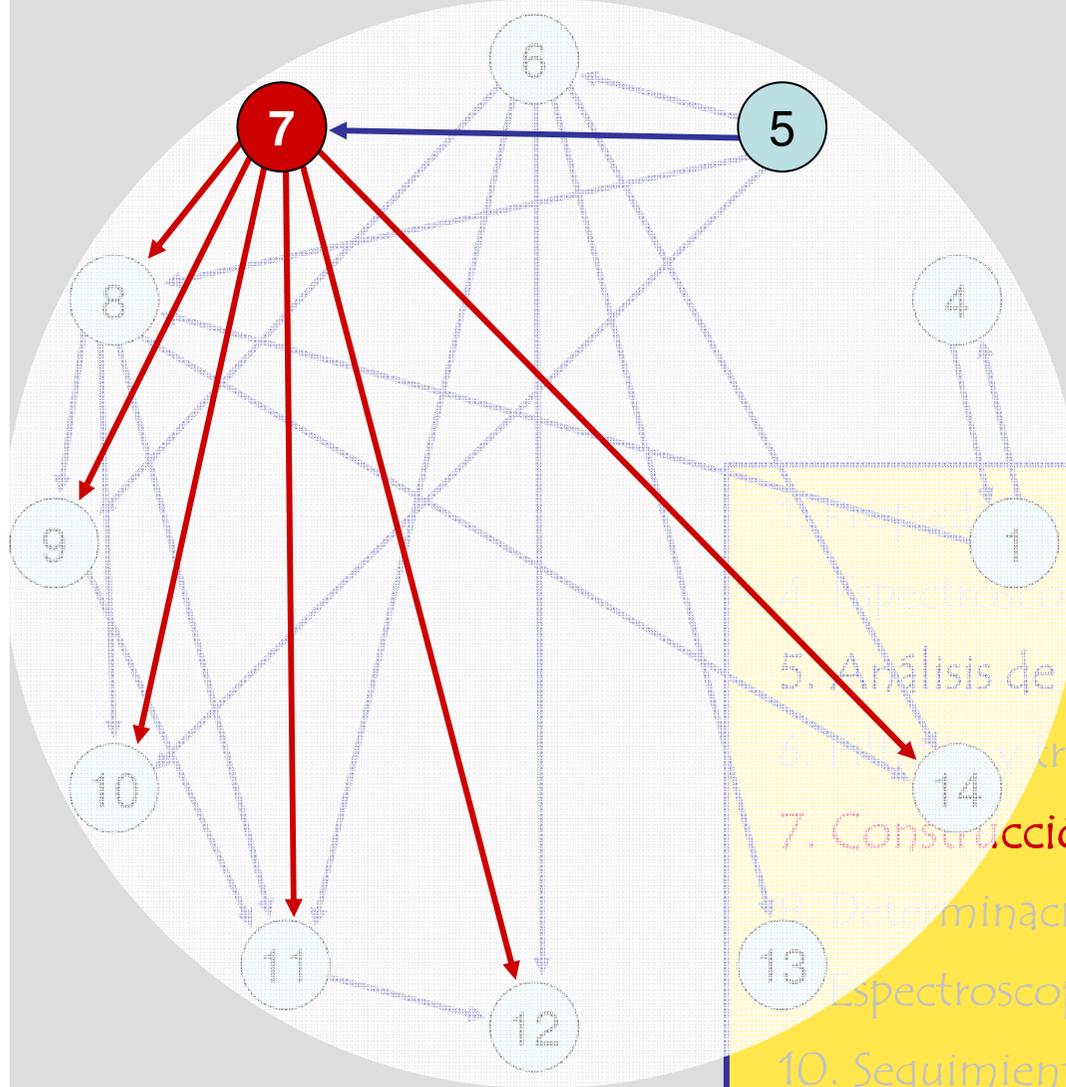
$$A = A_{t=0} \cdot \exp(-k_{\text{obs}} \cdot t)$$

- | | |
|--|-----------------------------|
| 1.- El tiempo dedicado al aprendizaje ha sido | 1(mayor), 2, 3, 4, 5(menor) |
| 2.- El material ha sido adecuado | 1 (no), 2, 3, 4, 5(si) |
| 3.- Teniendo en cuenta todas las circunstancias.
¿Ha sido eficaz el procedimiento de aprendizaje? | 1(no), 2, 3, 4, 5(si) |
| 4.- ¿Has sido más consciente de lo que has aprendido
que cuando hay una exposición magistral previa? | 1(no), 2, 3, 4, 5(si) |
| 5.- ¿Has detectado con claridad la vinculación con los
temas ya estudiados en este o en otros cursos? | 1(no), 2, 3, 4, 5(si) |
| 6.- ¿Piensas que esta materia es aplicable
en tu formación de químico? | 1(no), 2, 3, 4, 5(si) |
| 7.- ¿Has utilizado ayuda adicional para estudiar el tema? | 1(no), 2, 3, 4, 5(si) |

n = 8



Vinculación entre las actividades (caso 2)



Cálculo Numérico y Estadística Aplicada
2º de Grado (4º semestre)

1. Caracterización de la radiación electromagnética
2. Experimento de prisma y espectros de emisión
3. Análisis de modelos funcionales
4. Transformación de señales
5. Construcción y evaluación de modelos de regresión
6. Determinación con señales específicas en el visible
7. Espectroscopia derivada
8. Seguimiento espectrofotométrico de una cinética
9. Cuantificación con señales no específicas en el UV/Vis
10. Determinaciones con señales no específicas en el NIR
11. Elucidación estructural
12. Aplicaciones: Extracción de cafeína

2

PROYECTO

APRENDIZAJE AUTÓNOMO

REGRESIÓN NO LINEAL POR MÍNIMOS CUADRADOS

Aprender una **nueva materia** utilizando conocimientos adquiridos junto con información adicional

Requiere un esfuerzo importante para establecer **analogías y diferencias**

No es una práctica, ni se trata de leer un capítulo con sus apartados ordenados, ejemplos y ejercicios.

Al estudiante se le hace 'correr el riesgo' **de aprender conocimiento científico** por sí mismo

Al final, en clase, se buscará comprender **en qué y por qué hay dificultades**, si es el caso

2.1

PLANTEAMIENTO

CONOCIMIENTOS PREVIOS

- ✓ Ajuste y validación de modelos de **regresión lineal** univariante y multivariante
- ✓ Su uso para obtener **información fiable**, sin modelo teórico (Diseño de experimentos)
- ✓ Manejo de Statgraphics

OBJETIVO

Ajuste y validación de **modelos teóricos no lineales** a datos experimentales

2.2

ACTIVIDADES NO PRESENCIALES

ACTIVIDAD 1

Manejo de herramientas para el cómputo

- ✓ Material en la plataforma

Teoría de **modelos dinámicos**. Modelos cinéticos en química.

Tutorial (formato ppt) sobre el uso del módulo de regresión no lineal en Statgraphics. Con bibliografía

Datos experimentales para seguir el tutorial

- ✓ **Guión** en el que se señalan algunas cuestiones sobre elección de parámetros, sentido químico de los datos, validación e interpretación de los modelos



1 Datos

	t_seg	Absorbancia	Col_3	Col_4	Col_5
1	0	0.9815	$A_{inf} + (A_0 - A_{inf}) \cdot \exp(-k \cdot t_{seg})$		
2	120	0.9774			
3	240	0.9757			
4	360	0.9731			
5	480	0.9705			
6	600	0.9685			
7	720	0.9665			
8	840	0.9652			
9	960	0.9618			
10	1080	0.9602			
11	1200	0.9574			
12	1320	0.953			
13	1440	0.9513			
14	1560	0.9486			
15	1680	0.9467			
16	1800	0.942			
17	1920	0.9419			
18	2040	0.9398			
19	2160	0.9356			
20	2280	0.9342			
21	2400	0.933			
22	2520	0.9297			
23	2640	0.9261			
24	2760	0.9248			
25	2880	0.9218			
26	3000	0.9204			
27	3120	0.9188			
28	3240	0.9167			
29	3360	0.9146			

Observa atentamente el formato para escribir la ecuación

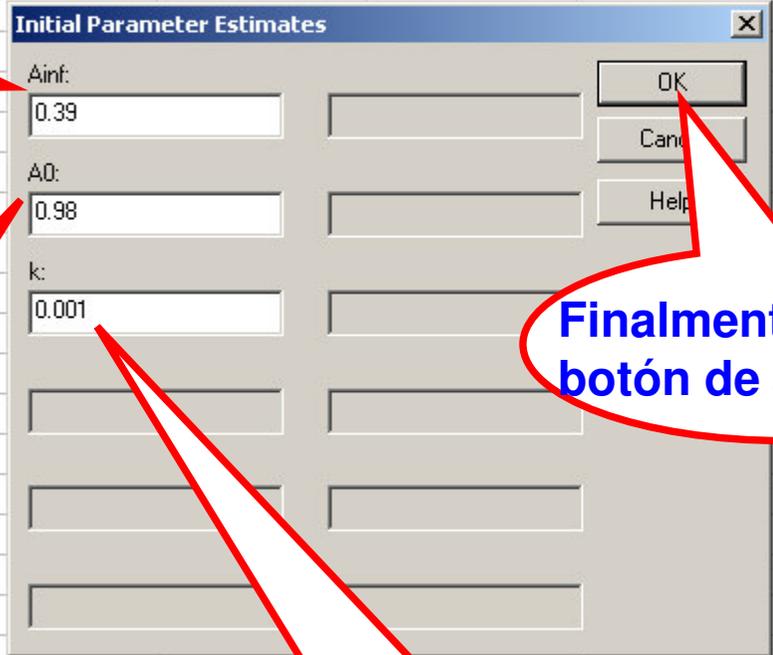
Los términos de la expresión que no coinciden con el nombre de columnas serán considerados como los parámetros a estimar, es decir A_{inf} , A_0 y k

Mientras que la variable independiente lleva el mismo nombre "t_seg" que la columna en la que se han anotado sus valores

2 Ajuste

El método iterativo de cálculo necesita una solución inicial para cada parámetro:

Para **Ainf** se toma 0.39 que es el último valor registrado (a t más elevado).



The dialog box titled "Initial Parameter Estimates" contains three input fields with the following values: Ainf: 0.39, A0: 0.98, and k: 0.001. There are also buttons for OK, Cancel, and Help.

Finalmente pulsa el botón de aceptar

Para **A0** se toma 0.98 que es el primer valor registrado (a t igual a cero segundos).

Para **k** se toma 1×10^{-3} un valor "razonable"

	t_seg	Absorbancia	Col_3	Col_4	Col_5
1	0	0.9815	$A_{inf} + (A_0 - A_{inf}) \cdot \exp(-k \cdot t_{seg})$		
2	120	0.9774			
3	240	0.9757			
4					
10					
11	1200	0.9574			
12	1320	0.953			
13	1440	0.9513			
14	1560	0.9486			
15	1680	0.9467			
16	1800	0.942			
17	1920	0.9419			
18	2040	0.9398			
19	2160	0.9356			
20	2280	0.9342			
21	2400	0.933			
22	2520	0.928			
23					
29					
30	3480	0.9125			

2 Ajuste

2. Criterio 1 de parada:
Cambio mínimo relativo en la suma de cuadrados de una iteración a la siguiente

Datos del método iterativo de cálculo, algoritmo, convergencia y nivel de confianza

3. Criterio 2 de parada:
Cambio mínimo relativo en todos los parámetros de una iteración a la siguiente

Nonlinear Regression Options

Estimation

Stopping Criterion 1: 0.00001

Stopping Criterion 2: 0.0001

Maximum Iterations: 30

Maximum Function Calls: 200

Confidence Level: 95.0

Method

Marquardt

Gauss-Newton

Steepest Descent

Marquardt Parameter

Initial Value: 0.01

Scaling Factor: 20.0

Maximum Value: 120.0

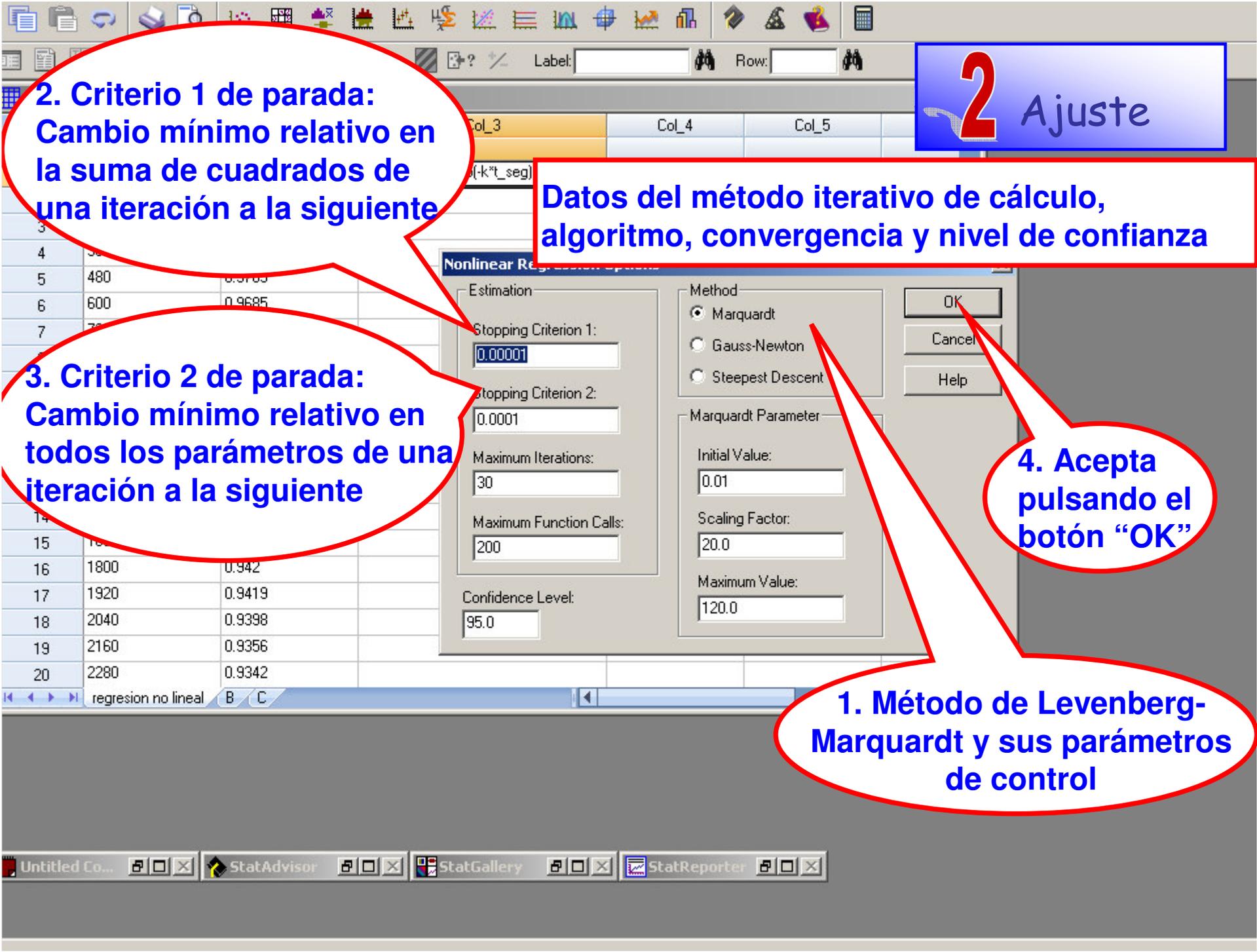
OK

Cancel

Help

4. Acepta pulsando el botón "OK"

1. Método de Levenberg-Marquardt y sus parámetros de control



2.3

ACTIVIDADES NO PRESENCIALES

ACTIVIDAD 2

Modelo con dos variables predictoras

- ✓ Material en la plataforma
Archivo con los **datos de vida útil de un producto**.
Caso de estudio de "Procter&Gamble" sobre disponibilidad de cloro en productos de limpieza
- ✓ **Guión** con el modelo propuesto y referencias de análisis ya efectuados en la bibliografía
- ✓ El estudiante debe hacer una **propuesta justificada de cuando ha de retirarse el producto**

2.4

ACTIVIDADES NO PRESENCIALES

ACTIVIDAD 3

Cinética de una isomerización térmica

- ✓ Material en la plataforma
Archivo con los **datos experimentales procedentes de un experimento** (38 experimentos individuales)
- ✓ **Guión** con el problema, modelo propuesto y la referencia bibliográfica.
- ✓ Además del cálculo de los parámetros el estudiante ha hacer un análisis gráfico de la **superficie de respuesta ajustada**
- ✓ Ajuste y análisis del mismo modelo utilizando únicamente los datos de **8 experiencias**

2.5

ACTIVIDAD PRESENCIAL

PARA DISCUTIR EN EL AULA

Al estudiante, junto al informe sobre las tres actividades, **se le pide que compare** la regresión no lineal con el procedimiento para la regresión multilineal **y que anote:**

- ✓ Tres características del procedimiento **similares**
- ✓ Tres características del procedimiento **distintas**
- ✓ Tres cuestiones que le han resultado difíciles de entender y **no acierta a explicar bien**
- ✓ Tres cuestiones que **no ha logrado entender**

2.6

ACTIVIDAD PRESENCIAL

EXPOSICIÓN GUIADA POR LAS ANOTACIONES DE LOS ESTUDIANTES

No hubo dudas en cuanto a los **aspectos operativos**

Fueron más abundantes las preguntas sobre la **asignación de los valores iniciales**

Los alumnos no percibieron las implicaciones de **no tener una solución explícita** al problema de minimizar la suma de cuadrados para ajustar el modelo no lineal. Se limitaron a **seguir sin ninguna crítica** las instrucciones del tutorial.

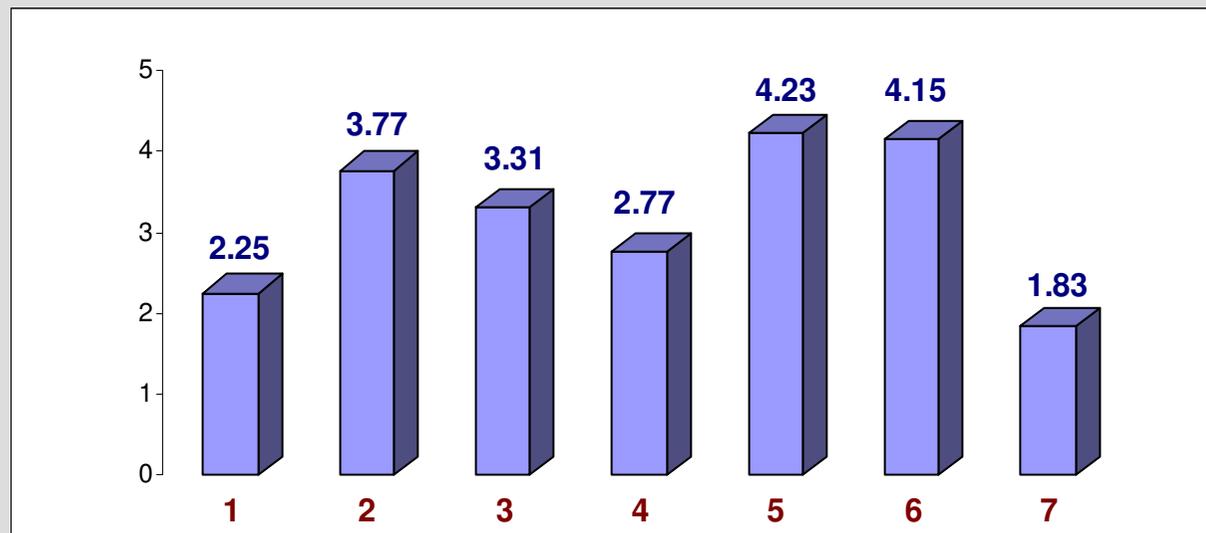
En el análisis comparativo de la actividad 3, ninguno intentó analizar la estructura del diseño en relación a los datos experimentales iniciales

2.7

EVALUACIÓN DE LA METODOLOGÍA

- | | |
|--|-------------------------|
| 1.- El tiempo dedicado al aprendizaje ha sido | 1(mayor), ..., 5(menor) |
| 2.- El material ha sido adecuado | 1 (no), 2 , 3, 4, 5(si) |
| 3.- Teniendo en cuenta todas las circunstancias.
¿Ha sido eficaz el procedimiento de aprendizaje? | 1(no), 2, 3, 4, 5(si) |
| 4.- ¿Has sido más consciente de lo que has aprendido
que cuando hay una exposición magistral previa? | 1(no), 2, 3, 4, 5(si) |
| 5.- ¿Has detectado con claridad la vinculación con los
temas ya estudiados en este o en otros cursos? | 1(no), 2, 3, 4, 5(si) |
| 6.- ¿Piensas que esta materia es aplicable
en tu formación de químico? | 1(no), 2, 3, 4, 5(si) |
| 7.- ¿Has utilizado ayuda adicional para estudiar el tema? | 1(no), 2, 3, 4, 5(si) |

n = 13



2.7

EVALUACIÓN DE LA METODOLOGÍA

Globalmente los alumnos **han necesitado mayor tiempo** para el aprendizaje del tema que el que en su opinión hubieran necesitado con un desarrollo clásico basado en lecciones magistrales.

Su valoración de la **eficacia** del aprendizaje no es negativa

Comprenden bien la **vinculación** del tema "regresión no lineal" con los previos desarrollados así como su utilidad para su formación como químico.

En general no han recurrido a otras **fuentes de información** y en su caso han utilizado fuentes a través de Internet, no la bibliografía referenciada.

2.8

CONCLUSIONES

SOBRE EL PROCESO DE APRENDIZAJE LA PERSPECTIVA DEL PROFESOR

El **debate** a partir de las cuestiones fue muy vivo

Sólo hicieron falta **dos sesiones de una hora** para explicar el tema de regresión no lineal y se alcanzó un alto nivel de conocimientos

Una vez organizado el material, **el profesor sólo actúa al final del proceso**, para completar posibles deficiencias

Esta experiencia muestra cómo dejar suficiente espacio, **para ejercitar el autoaprendizaje**, cuando se programa una actividad docente mediante **recursos electrónicos (e-learning)**

**Gracias a todo el Grupo de profesores
participantes, a los alumnos y a vosotros
por vuestra atención**