GUÍA DOCENTE 2016-2017

Métodos Multivariantes y Tecnología Analítica de Procesos

1. Denominación de la asignatura:

Métodos Multivariantes y Tecnología Analítica de Procesos

Titulación

Grado en Química

Código

6294

2. Materia o módulo a la que pertenece la asignatura:

Formación avanzada multidisciplinar

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

Matemáticas y Computación. Química

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

Luis Antonio Sarabia Peinador. María de la Cruz Ortiz Fernández. Ana Herrero Gutiérrez

4.b Coordinador de la asignatura

LUIS ANTONIO, SARABIA PEINADOR

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

4º curso (7º semestre)

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

Optativa

7. Número de créditos ECTS de la asignatura:

6

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

En teoría:E-6,E-18,G3,G4,G5,G6,G9 En prácticas:T1,T2,T6,T8,T11,T18 En Seminarios:E1,E1,E1,E1,E1,E1, En trabajo en grupo:T4,T8,T10,T18,T20 Exposición oral:T8,T21,T20 Evaluación escrita:T1,T2,T8

9. Programa de la asignatura

9.1- Objetivos docentes
O1. Conocer y aplicar distintas técnicas de regresión multivariante para la construcción de modelos predictivos a partir de datos experimetales. O2.Aplicar técnicas de regresión multivariante en calibrados instrumentales. O3. Realizar, interpretar y evaluar modelos sobre variables latentes cuando sea necesario por la estructura de los datos. O4. Conocer los fundamentos y elementos de la tecnología analítica de procesos como sistema para el análisis y control de procesos. O5. Conocer y analizar procesos de fabricación basados en medidas on-line de parámetros de calidad críticos y relacionarlos con características de la materia prima, de los reactivos y los parámetros del proceso. O6. Comprender el papel central del análisis multivariante de datos para la descripción del funcionamiento práctico de un proceso, su control, la detección de situaciones anómalas y el diagnóstico de fallos. O7. Tomar decisiones de forma objetiva en ambiente de incertidumbre. O8. Manejar software específico. O9. Conocer la instrumentación utilizada (espectroscopía, cromatografía y técnicas FIA) para obtener datos de un proceso durante la producción. O9. Planificación del discurso y expresión oral correcta apoyada en medios audiovisuales. O10. Reflexión crítica sobre el proceso de aprendizaje. O12. Saber ser, estar, y trabajar en trabajos colaborativos en grupos grandes.

9.2- Unidades docentes (Bloques de contenidos)

MODELOS MULTIVARIANTES EN EL PAT

INTRODUCCIÓN AL MODELADO MULTIVARIATE

El orden de la señal. Modelos basados en señales de orden cero: limitaciones
Modelos basados en señales de orden uno: posibilidad de calibrar interferentes conocidos.
Modelos basados en señales de orden dos o superior: posibilidad de calibrar en presencia de interferentes no conocidos.

MODELOS BASADOS EN COMPONENTES PRINCIPALES

La regresión multilineal por mínimos cuadrados. Concepto de modelo blando.
Necesidad de estos modelos cuando existen correlación y/o colinealidad en los datos.
Modelos basados en técnicas de regresión mínimo cuadrática sobre componentes principales (PCReg). Pretratamiento. Elección del número de componentes adecuadas.
Interpretabilidad de las componentes principales. Construcción de modelos predictivos.
Necesidad de estos calibrados en la determinación de mezclas multicomponentes con señales no específicas.
Aplicaciones de la regresión sobre componentes principales en problemas industriales.
Práctica: Determinación simultánea de colorantes alimentarios contenidos en alimentos mediante espectroscopia UV-visible y calibración sobre componentes principales

MODELOS BASADOS EN MÍNIMOS CUADRADOS PARCIALES

Criterio de ajuste de la regresión en mínimos cuadrados parciales (PLS).
Pretratamiento: centrado, autoescalado, derivadas, SNV. Aplicación del pretratamiento a distintos tipos de señales instrumentales (NIR, fluorescencia, UV-vis). Elección correcta de las variables latentes. Validación cruzada.
Capacidad predictiva de los modelos PLS. Posibilidad de detectar datos anómalos: Índices Q y T2. Poder modelante de las variables originales.
Aplicación de modelos PLS en calibrados multivariantes con señales solapadas. Modelado de interferencias. Aplicaciones en polarografía, voltamperometría, espectroscopia molecular en el UV-visible, fluorescencia molecular, espectroscopia NIR y MIR, espectrometría de masas.
Aplicaciones industriales de PLS
Práctica 1: Determinación de una mezcla de tres farmácos comerciales mediante espectroscopia de UV-visible y calibración PLS.
Práctica 2: Determinación de humedad y proteína en forrajes mediante espectroscopía NIR y calibración PLS. Efecto de distintos pretratamientos (derivadas, SNV) sobre las figuras de mérito obtenidas con el modelo PLS.

DETERMINACIONES EN-LÍNEA

Necesidad de adaptar las técnicas instrumentales para extraer y manejar información físico-química “en-línea”. Ventajas e inconvenientes.
Sistemas de medida on-line de tipo espectroscópico (UV-vis y NIR), cromatográfico y de análisis por inyección en flujo.

CONTROL MULTIVARIANTE DE PROCESOS

Naturaleza multivariante de la calidad.
Definición de la calidad final de un producto.
Características de los datos de proceso y orden de la señal. Análisis de un proceso y de su funcionamiento práctico, uso de las variables latentes.
Ventaja del control multivariante sobre el uso de múltiples controles univariantes.
Modelado y optimización industrial, de acuerdo con las recientes propuestas de la FDA sobre tecnología analítica de procesos (PAT) y del Protocolo Armonizado (sobre "Quality by Design" y espacios de diseño, DS) para garantizar la calidad de productos.

9.3- Bibliografía

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Cserháti, T. , (2008) Multivariate methods in chromatography. A practical guide,, Wiley, New Jersey,
Da-We_Sun (Ed), (2009) Infrared spectroscopy for food quality analysis and control,, Elsevier, Amsterdam, 978-0-12374136-3,
E. Baughman, (2005) Process Analytical Technology, Ed. Katherine A. Bakeev, Blackwell Publishing, Oxford, 978-1-4051-2103-3,
Massart, D.L, Vandeginste, B.G.M. Buydens, L.M.C. Jong, S. de Smeyeers-Verbeke,, (1997) Handbook of Chemometrics and Qualymetrics; Part A and Part B, Elsevier, Amsterdam,
Næs, T., Isaksson, T., Fearn, T., Davies, T., (2002) Multivariate Calibration and Classification, NIR Publications, Chichester, 0-44489724-0,
R, (2009) Comprehensive Chemometrics, Brown, S.D., Tauler, R., Walczak, B. (Eds),Chemical and Biochemical data analysis. Four-Volume set, Elsevier, Amsterdam,
Smilde, A., Bro, R., Geladi, P., (2004) Multi-way analysis with applications in the chemical sciences, John Wiley & Sons, Chichester,
U.S. Food and Drug Administration. , Guidance for Industry: PAT—A Framework for Innovative Pharmaceutical Development, Manufacturing, and Quality Assurance. , 2004a, Available at http://www.fda.gov/cder/ guidance/6419fnl.pdf,
Y. Ozaki, W.F. McClure, A. A. Christy, (2007) Near-Infrared Spectroscopy in Food Science and Technology, Y. Ozaki, W.F. McClure, A. A. Christy Eds, Wiley-.Interscience, New Yersey, 978-0-471-67201,

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Box G.E.P., Draper N.R., (1987) ,Empirical Model Building and response surfaces,, John Wiley & Sons, New York,
M. Blanco, V. Cerdà (Eds)), (2007) Temas avanzados de Quimiometría, Universitat de les Illes Balears, Palma de Mallorca, 987-84-8384-006-1,

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

La docencia se desarrollará en el laboratorio de cómputo y en el aula, alternando el análisis de ejemplos y casos de estudio con los elementos teóricos necesarios y el análisis de los resultados de las prácticas realizadas en el laboratorio de análisis químico. En esta actividad presencial se utilizarán sistemáticamente las TICs y la participación activa del alumno.
Se realizarán 5 sesiones experimentales en el laboratorio de Química Analítica para aplicar posteriormente la metodología de regresión multivariante a calibrados instrumentales que proporcional datos multivía. Está activiad práctica estará completamente coordinada conceptual y formalmente con la anterior. Adicionalmente en las sesiones presenciales para exposición y debate, conducidas por los profesores responosables de ambas actividades, en seminarios teórico-prácticos, se hará una síntesis crítica de la metodología y su aplicación en el ámbito industrial.

Metodología	Competencia relacionada	Horas presenciales	Horas de trabajo	Total de horas
Clase Teoría	E1,E6,E18,G3,G4,G5, G6,G9	13	20	33
Clases prácticas en laboratorio de Química	T1,T2,T6,T8,T11,T18	15	24	39
Clases prácticas en laboratorio de cómputo	T1,T2,T6,T8,T11,T18	21	35	56
Seminario, debate	T8,T21,T20	2	4	6
Realización trabajos e informes	T4,T8,T10,T18,T20	0	8	8
Evaluación escrita	T8,T1,T2	2	0	2
Exposición oral	T8,T21,T20	1	5	6
Total		54	96	150

11. Sistemas de evaluación:

Evaluación continua en los términos de las directrices aprobadas por la Facultad de Ciencias.

Por su propia naturaleza, la evaluación de la "Participación en las sesiones presenciales" no es recuperable en segunda convocatoria.

Se requiere un mínimo de 4 (sobre 10) en cada procedimiento, excepto para la 2ª convatoria en el procedimiento "Participación en las sesiones presenciales (clases teórico-prácticas, seminarios, tutorías, etc.)".

Se deberá alcanzar un cinco sobre diez para aprobar la asignatura.

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 vigente en la actualidad.

Procedimiento	Peso primera convocatoria	Peso segunda convocatoria
Participación en las sesiones presenciales (clases teórico-prácticas, seminarios, tutorías, etc.)	20 %	20 %
Realización de trabajos y presentación de informes	20 %	20 %
Pruebas escritas individuales presenciales	40 %	40 %
Resolución de ejercicios y casos prácticos	20 %	20 %
Total	**100 %**	**100 %**

Evaluación excepcional:

Para aplicar esta modalidad de evaluación es obligatorio la realización de las prácticas de laboratorio de análisis y/o de cómputo con el fin de evaluar las habilidades y destrezas correspondientes. Se requiere un mínimo de 4 sobre 10 en la evaluación de los siguientes procedimientos
- Resolución de casos prácticos (40%),
- Respuesta a preguntas sobre los fundamentos de las técnicas usadas (40%),
- Presentación oral y un breve debate con los profesores sobre las conclusiones obtenidas (20%).

La calificación requerida para aprobra será de cinco sobre diez.

12. Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial:

Se mantendrá una atención tutorial personalizada durante el horario establecido por la Universidad.

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