



UNIVERSIDAD DE BURGOS

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA, DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS Y COMPUTACIÓN

GUÍA DOCENTE 2014-2015

Métodos quimiométricos multivariantes y multivía

1. Denominación de la asignatura:

Métodos quimiométricos multivariantes y multivía

Titulación

Máster Universitario en Química Avanzada

Código

7478

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) :

M^a Cruz Ortiz, Luis A. Sarabia, Ana Herrero, M^a Sagrario Sánchez

3.b Coordinador de la asignatura

M^a Cruz Ortiz Fernández

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 y 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

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 interdisciplinarios 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. Identificar los métodos existentes para análisis multivariante de datos.
2. Conocer algunas aplicaciones concretas.
3. Considerar el análisis de agrupamiento como generador de hipótesis de trabajo.
4. Comprender la diferencia entre un método de clasificación y uno de modelado.
5. Caracterizar categorías mediante técnicas de reconocimiento de pautas aplicadas a datos multivariantes.
6. Evaluar sensibilidad y especificidad de modelos de clases.
7. Comprender los fundamentos de los métodos de regresión de dos y tres vías.
8. Evaluar en qué casos los métodos multivía pueden ser de utilidad.
9. Construir modelos con carácter predictivo.
10. Seleccionar la técnica de calibrado adecuada a cada problema analítico concreto.
11. Aplicar las técnicas de regresión multivía e interpretar los resultados obtenidos.
12. Profundizar en las posibilidades cuantitativas de la instrumentación acoplada mediante la calibración multivía.
13. Manejar las posibilidades de las señales de orden dos o superior para la determinación analítica en presencia de interferentes desconocidos y para las tecnologías analíticas de proceso.



9.2- Unidades docentes (Bloques de contenidos)

Análisis multivariante de datos químicos

0. Introducción

Conjuntos de datos: matrices, cubos, etc. Pretratamiento. Niveles del reconocimiento de pautas y su aplicabilidad a la tipificación multivariante de procesos y productos industriales.

1. Técnicas exploratorias multivariantes

Análisis de agrupamientos jerárquicos y no jerárquicos. Componentes principales. Análisis de Correspondencias. Técnicas biplot. Interpretabilidad de las componentes.

2. Clasificación multivariante

Técnicas basadas en normalidad multivariante (análisis discriminante lineal, LDA, y cuadrático, QDA). Técnicas no paramétricas: Método del entorno más próximo (KNN) y árboles de clasificación (CART).

3. Técnicas de modelado multivariante

Modelado basado en normalidad multivariante (UNEQ) y basado en componentes principales (SIMCA). Poder modelante y poder discriminante de las variables. Sensibilidad y especificidad de modelos. Aplicaciones en la industria, medioambiente, alimentación, etc.

4. Técnicas de regresión multivariante

Modelos de regresión por mínimos cuadrados. Datos anómalos y regresiones robustas. Predicción con los modelos de regresión. Selección de variables. Confianza en las predicciones. Colinealidades y correlaciones entre variables, algunas alternativas: regresiones paso a paso y regresiones basadas en variables latentes (PCReg y PLS)

Aplicaciones de las técnicas de regresión multivariante-multivía

5. Aplicaciones al calibrado instrumental

El orden de la señal. Métodos de dos vías. Calibrados blandos basados en componentes principales. Calibrados mediante mínimos cuadrados parciales (PLS). Aplicación a datos procedentes de técnicas espectroscópicas: Espectroscopia NIR y MIR, espectroscopia molecular ultravioleta-visible, fluorescencia molecular excitación y/o emisión, polarografía, voltamperometría, etc.

Métodos de tres o más vías. nPLS. Descomposición factorial mediante el análisis factorial paralelo (PARAFAC). Ventaja de orden dos. PARAFAC2, TUCKER y otras posibilidades metodológicas. Aplicaciones a la instrumentación acoplada (CG-MS, HPLC-DAD, CL-MS-MS, técnicas de flujo con detector electroquímico), otras técnicas (fluorescencia molecular de excitación-emisión).



Capacidad de detección con evaluación de la probabilidad de falso positivo y falso negativo. Evaluación de falsas no conformidades y falsas conformidades cuando se ha establecido un límite máximo de residuos.

6. Aplicaciones en el ámbito industrial

Modelos para la tipificación de productos y procesos (PLS-CM). Clasificación de productos basada en variables cualitativas. Curvas de riesgo y evaluación de las probabilidades de falsa no conformidad y falsa conformidad con datos multivariantes. Regresiones entre variables de proceso y variables de producto. Relaciones entre variables físico-químicas y sensoriales. Modelos predictivos con variables químicas y de aceptación del consumidor.

9.3- Bibliografía

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Brown, S.D., Tauler, R., Walczak, B. (Eds), (2009) Comprehensive Chemometrics. Chemical and Biochemical data analysis, Elsevier, Amsterdam,

Cserháti, T., (2008) Multivariate methods in chromatography. A practical guide, Wiley,

Da-Wen Sun (Ed.), (2009) Infrared spectroscopy for food quality analysis and control, AP,

Gordon, A.D., (1999) Classification, 2, Chapman & Hall/CRC, Florida,
<http://www.ubu.es> Libros electrónicos.

Kaufman L., Rousseauw, P.J., (1990) Finding groups in data. An introduction to cluster analysis, John Wiley & Sons,

N.R. Draper, H. Smith, (1998) Applied regression analysis, 3rd ed, Wiley, New York,

Sarabia L.A., Ortiz, M.C., (1994) Análisis de correspondencias en R. Cela (coord.), Avances en quimiometría práctica, Servicio de Publicaciones e Intercambio Científico de la Universidad de Santiago de Compostela, Santiago de Compostela,

Sarabia L.A., Ortiz, M.C., (2007) Análisis de agrupaciones (cluster), en Marcel Blanco, Víctor Cerdá (eds.), Temas avanzados de quimiometría, Universidad de las Islas Baleares, Palma, 389-420

Smilde, A., Bro, R., Geladi, P., (2004) Multi-way analysis with applications in the chemical sciences , John Wiley & Sons, Chichester,

**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 el uso de software profesional específico para los objetivos fijados (PLS Toolbox en Matlab, STATGRAPHICS, PARVUS, PROGRESS y otros). Los conceptos se introducen mediante el estudio de ciertos casos reales y mediante la obtención, en el laboratorio de análisis, de datos experimentales adecuados al tipo de problema. Esos datos se usarán como ejemplo práctico para que el estudiante aplique la metodología, elabore un informe y lo defienda.

Una vez comprendidos los fundamentos teóricos y comprobado que se han aplicado correctamente para la resolución del problema propuesto, seguirá 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.

Metodología	Competencia relacionada	Horas presenciales	Horas de trabajo	Total de horas
Clases teóricas	CB6, CB7, CG2 CE1,CE3, CE6, CE7,CE8	8	16	24
Clases prácticas	CB6, CB7,CB10 CE1,CE3, CE6, CE7,CE8	24	24	48
Seminarios y tutorías	CB8, CB9, CB10 CG1, CG2, CG5 CE1,CE3, CE6, CE7,CE8	4	4	8
Elaboración de trabajos e informes	CB7, CB9 CG6 CE1,CE3, CE6, CE7,CE8	1	16	17
Presentación y debate de resultados	CB7, CB9 CG6 CE1,CE3, CE6, CE7,CE8	4	8	12



Pruebas escritas individuales	CB7, CB8, CB9 CG6 CE1,CE3, CE6, CE7,CE8	4	12	16
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 4 (sobre 10) en cada procedimiento.

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
Pruebas escritas individuales presenciales	25 %	25 %
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 %
Total	100 %	100 %

Evaluación excepcional:

En la misma fecha y hora que las convocatorias no excepcionales, el estudiante deberá realizar pruebas presenciales individuales para mostrar la adquisición de competencias propias de la disciplina:

- resolviendo casos prácticos (40%),
- respondiendo a preguntas sobre los fundamentos de las técnicas usadas (40%),
- presentación oral y un breve debate con los profesores sobre las conclusiones obtenidas (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 se establezcan

14. Idioma en que se imparte:

Español