



GUÍA DOCENTE 2012-2013

Metodología avanzada de diseño de experimentos y cómputo natural

1. Denominación de la asignatura:

Metodología avanzada de diseño de experimentos y cómputo natural

Titulación

Máster Universitario en Química Avanzada

Código

5250

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) :

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

3.b Coordinador de la asignatura

Luis A. Sarabia

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

Segundo 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 también 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 GENÉRICAS (INSTRUMENTALES, INTERPERSONALES Y SISTÉMICAS).

- C14. Aplicación del razonamiento deductivo y aprovechamiento de la capacidad creativa, mediante su introducción en la investigación aplicada.
- C15. Capacidad de análisis y síntesis.
- C16. Capacidad de organización y adaptación a nuevas situaciones.
- C17. Capacidad para elaborar y presentar informes.
- C18. Capacidad de comunicación oral y escrita en la lengua nativa.
- C19. Conocimientos a nivel de usuario de herramientas informáticas y tecnologías de la información (TIC's).
- C20. Habilidades para aplicar los conocimientos teóricos a la práctica.
- C21. Habilidades para el estudio y el aprendizaje de forma autónoma.
- C22. Habilidades para la búsqueda y obtención de información, ya sea en fuentes primarias como en las secundarias, incluyendo la que se consigue a través de comunicación on-line y mediante acceso a bancos de datos.
- C23. Integración en grupos de trabajo y capacidad de autoevaluación.
- C24. Motivación por la calidad.
- C25. Razonamiento crítico.
- C26. Resolución de problemas relativos a la información cualitativa y cuantitativa.

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS (DESTREZAS Y CONOCIMIENTOS)

-De conocimiento (saber)

- C1. Comprender la metodología del diseño de experimentos.
- C2. Conocer diseños experimentales “estándar” y su adecuación al tipo de problema.
- C3. Conocer el fundamento de los algoritmos genéticos.
- C4. Comprender el concepto de red neuronal y su entrenamiento.
- C5. Conocer la existencia de métodos alternativos basados en cómputo y su fundamento.

-De destrezas (saber hacer)

- C6. Aportar soluciones a problemas en los términos en que son planteados.



- C7. Llevar a cabo los diferentes aspectos técnicos en el ámbito de trabajo.
- C8. Evaluar, interpretar y resumir datos e información química.
- C9. Implementar buenas prácticas científicas de medida y experimentación.
- C10. Manejar software específico.
- C11. Optimizar procedimientos de análisis, procesos y productos.
- C12. Planificar, diseñar y ejecutar (desarrollar) investigaciones prácticas desde el reconocimiento del problema hasta la evaluación de los resultados.
- C13. Tomar decisiones objetivas en ambiente de incertidumbre.

9. Programa de la asignatura

9.1- Objetivos docentes

1. Comprender la necesidad de una metodología de experimentación.
2. Comprender la diferencia entre métodos matemáticos analíticos y métodos computacionales, su fundamento y su aplicabilidad.
3. Conocer algunas aplicaciones concretas del diseño de experimentos y del cómputo natural.
4. Comprender y manejar operativamente las herramientas de diseño de experimentos para el planteamiento y resolución de problemas en el ámbito de la investigación científica y la aplicación industrial.
5. Plantear el modelo adecuado a cada diseño experimental que explique las relaciones funcionales entre los factores y las respuestas.
6. Realizar el plan experimental pertinente en cada caso analizado.
7. Analizar la significación de factores experimentales en el dominio analizado.
8. Detectar y cuantificar la influencia de factores en una o varias respuestas experimentales.
9. Saber utilizar diseños eficientes. Utilizar la secuencialidad y el bloqueo.
10. Buscar óptimos en superficies de respuesta.
11. Manejar las funciones de deseabilidad y otras alternativas como el frente Pareto en el contexto del análisis químico, en un proceso y en la fabricación del producto.
12. Construir diseños experimentales basados en D-optimalidad u otras propiedades.
14. Optimización en problemas de mezclas con y sin restricciones.
14. Optimizar sin modelo funcional mediante algoritmos genéticos.
15. Construir, entrenar y validar una red neuronal.
16. Filtrar señales para mejorar la relación señal/ruido.



9.2- Unidades docentes (Bloques de contenidos)

Metodología del diseño de experimentos

1. Elementos del diseño de experimentos

Modelo matemático de un diseño. Matriz de experiencias. Plan experimental. Validación de los modelos. Efectos. Factores. Dominio experimental. Criterios: Diseños ortogonales, D-óptimos, E-óptimos, G-óptimos, isovariantes por rotación etc. Factores de inflación y factor de varianza. Clasificación de diseños por su finalidad.

2. Diseños para la selección de factores

Diseños de Hadamard y altamente fraccionales para selección de factores. Estimación de la varianza residual con réplicas y sin réplicas (método de Lenth). Diseños fraccionales a varios niveles: modelos de ausencia-presencia, modelos con estado de referencia. Diseños supersaturados. Aplicación al estudio de interferencias químicas. Aplicaciones a la robustez de procedimientos analíticos.

3. Diseños factoriales

Diseños factoriales a dos o más niveles. Planes experimentales. Cálculo de efectos de los factores principales y de las interacciones. Diseños fraccionales. Patrones de confusión. Generadores. Deriva. Bloqueo. Factores ambientales (diseños de Taguchi). Aplicaciones industriales y analíticas.

4. Diseños para superficies de respuesta

Búsqueda de óptimos mediante representación de la superficie de respuesta con diseños de dos factores. Diseños centrales compuestos, diseños pentagonales, hexagonales, etc. Secuencialidad con diseños Doehlert. Bloqueo. Optimización con más de dos factores. Método del camino óptimo. Optimización de la señal instrumental, de una extracción, de una síntesis. Optimización con más de una respuesta: Función de deseabilidad (Derringer) y frente Pareto. Aplicaciones

5. Diseños para mezclas

Restricciones de las mezclas. Regiones experimentales: simplex y poliédricas. Modelos de superficie de respuesta para mezclas. Diseños experimentales para mezclas: diseños de Scheffé, diseños de vértices extremos, diseños alrededor de una mezcla de referencia. Diseños combinados. Aplicaciones en análisis químico (mezclas de disolventes en extracciones y en cromatografía de líquidos), en problemas de mezclas en productos industriales, alimentarios y farmacéuticos.

6. Diseños no estándar

Necesidad de estos diseños por problemas de restricciones en el dominio experimental. Diseños basados en D-optimalidad. Modelos matemáticos. Puntos candidatos. Algoritmo de intercambio. Aplicaciones en problemas de gran coste experimental. Diseños específicos para simulaciones computacionales. Aplicación a la industria de



automoción, energética, etc.

7. Optimización secuencial

Optimización con modelos lineales. Método de máxima pendiente. Optimización sin modelo matemático. Optimización en línea.

Técnicas basadas en cómputo intensivo

8. Cómputo natural

Optimización mediante algoritmos genéticos.

Modelos no paramétricos basados en redes neuronales.

9. Filtrado de señales

Suavizado local polinomial, método de Savitzky-Golay.

Diferenciación mediante splines. Transformada de Fourier.

9.3- Bibliografía

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

S.D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (Eds), (2009) Comprehensive Chemometrics: Chemical and Biochemical Data Analysis. Four-Volume set, Elsevier, Amsterdam,

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

C. A Coello, G.B. Lamont (eds), (2005) Applications of Multi-Objective Evolutionary Algorithms, World Scientific,

G.E.P Box, N.R. Draper, (2007) Response Surfaces, Mixtures and Ridge Analysis, 2ª, John Wiley & Sons, Inc.,

R. Rojas, (1996) Neural Networks. A systematics introduction, Springer Verlag,

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 (NemrodW, Matlab) y haciendo uso de datos reales que definen casos de estudio.

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. Uso de datos experimentales (en el laboratorio de análisis químico, en la industria, en la



bibliografía) mediante el diseño experimental adecuado; interpretación y 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	C1-C14, C16, C20, C21, C4-C26	8	16	24
Clases prácticas	C1-C20, C22, C23	24	24	48
Seminarios y tutorías	C1-C14, C16, C20-C22, C4-C26	4	4	8
Realización de trabajos e informes	C1-C26	1	16	17
Presentación y debate de resultados	C15, C17-C19, C23	4	8	12
Pruebas individuales escritas	C1-C21, C23-C26	4	12	16
Total		45	80	125

11. Sistemas de evaluación:

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

Se requiere un mínimo de 3 (sobre 10) en la evaluación de las pruebas individuales presenciales.

La Participación en seminarios, tutorías y otras actividades presenciales no es recuperable en segunda convocatoria.

Procedimiento	Peso en la calificación final
Pruebas individuales escritas de carácter presencial	25 %
Realización de trabajos y presentación de informes	40 %
Resolución de ejercicios y casos prácticos	20 %
Participación en seminarios, tutorías y otras actividades presenciales	15 %
Total	100 %



Evaluación excepcional, si procede:

Examen escrito

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

14. Idioma en que se imparte:

Español