



GUÍA DOCENTE 2012-2013

Métodos quimiométricos multivariantes y multivía

1. Denominación de la asignatura:

Métodos quimiométricos multivariantes y multivía

Titulación

Máster Universitario en Química Avanzada

Código

5251

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 GENÉRICAS (INSTRUMENTALES, INTERPERSONALES Y SISTÉMICAS).

- C13. Aplicación del razonamiento deductivo y aprovechamiento de la capacidad creativa, mediante su introducción en la investigación aplicada.
- C14. Capacidad de análisis y síntesis.
- C15. Capacidad de organización y adaptación a nuevas situaciones.
- C16. Capacidad para elaborar y presentar informes.
- C17. Capacidad de comunicación oral y escrita en la lengua nativa.
- C18. Conocimientos a nivel de usuario de herramientas informáticas y tecnologías de la información (TIC's).
- C19. Habilidades para aplicar los conocimientos teóricos a la práctica.
- C20. Habilidades para el estudio y el aprendizaje de forma autónoma.
- C21. 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.
- C22. Integración en grupos de trabajo y capacidad de autoevaluación.
- C23. Razonamiento crítico.

1.COMPETENCIAS ESPECÍFICAS (DESTREZAS Y CONOCIMIENTOS)

1.1 De conocimiento (saber)

- C1. Conocer la información propia de la instrumentación química.
- C2. Definir y calcular capacidad de detección y sensibilidad de los modelos multivariantes.
- C3. Conocer métodos estadísticos multivariantes.
- C4. Identificar principios y procedimientos empleados en el análisis químico para la cuantificación de compuestos químicos.

1.2 De destrezas (saber hacer)



- C5. Aportar soluciones a problemas en los términos en que son planteados.
- C6. Llevar a cabo los diferentes aspectos técnicos en el ámbito de trabajo.
- C7. Evaluar, interpretar y resumir datos e información química.
- C8. Implementar buenas prácticas científicas de medida y experimentación.
- C9. Manejar software específico.
- C10. Procesar datos en relación con los modelos y la información química.
- C11. Tomar decisiones objetivas en ambiente de incertidumbre.
- C12. Planificar, diseñar y ejecutar (desarrollar) investigaciones prácticas desde el reconocimiento del problema hasta la evaluación de los resultados.

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. Regresión ACE (Alternating Conditional Expectation).

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).

6. Figuras de mérito

Sensibilidad analítica multivariante. NAS. Capacidad de detección con evaluación de la probabilidad de falso positivo y falso negativo. Límites máximos permitidos en residuos con evaluación de falsas no conformidades y falsas conformidades.



7. 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., (2007) Análisis de agrupaciones (cluster), en Marcel Blanco, Víctor Cerdá (eds.), Temas avanzados de quimiometría, Universidad de las Islas Baleares, Palma, 389-420

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,

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	C1-C8,C11-C13, C15, C19, C20, C23	8	16	24
Clases prácticas	C1-C15,C18-C20,C23	24	24	48
Seminarios y tutorías	C1-C13, C15, C19, C20, C21, C23	4	4	8
Elaboración de trabajos e informes	C1-C23	1	16	17
Presentación y debate de resultados	C14, C16-C18, C22	4	8	12
Pruebas escritas individuales	C1-C20, C22, C23	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 actividades presenciales no es recuperable en segunda convocatoria.

Procedimiento	Peso en la calificación final
Pruebas escritas individuales presenciales	25 %
Realización de trabajos y presentación de informes	40 %
Resolución de ejercicios y casos prácticos	20 %
Participación en seminarios, tutorías y 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 se establezcan

14. Idioma en que se imparte:

Español