



UNIVERSIDAD DE BURGOS

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA, DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS Y COMPUTACIÓN

GUÍA DOCENTE 2023-2024
Quimiometría y Cualimetría Alimentarias

1. Denominación de la asignatura:

QUIMIOMETRÍA Y CUALIMETRÍA ALIMENTARIAS

Titulación

MÁSTER EN SEGURIDAD Y BIOTECNOLOGÍA ALIMENTARIAS (PLAN 2013)

Código

7441

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

Seguridad Alimentaria y Alimentación Saludable

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

Departamento de Química, Departamento de Matemáticas y Computación

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

Ana Herrero, María Sagrario Sánchez, Silvia Sanllorente

4.b Coordinador/a de la asignatura

MARÍA SAGRARIO SÁNCHEZ PASTOR

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

Primer semestre

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

Optativa



7. Requisitos de formación previos para cursar la asignatura:

No se han establecido.

8. Número de créditos ECTS de la asignatura:

4

9. Competencias que debe adquirir el/la estudiante al cursar la asignatura

Máster en Seguridad y Biotecnología Alimentarias: En la página web del Título se encuentra disponible la vinculación entre los objetivos ODS y las competencias del Título: <https://www.ubu.es/master-universitario-en-seguridad-y-biotecnologia-alimentarias/informacion-basica/objetivos-y-competencias>

COMPETENCIAS BÁSICAS (según la memoria del título)

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.

COMPETENCIAS GENERALES

G1 - Capacidad de organización, planificación y toma de decisiones.

G2 - Habilidad para trabajar en equipo.

G3 - Resolver problemas en entornos nuevos dentro de contextos multidisciplinares relacionados con la Biotecnología y Seguridad Alimentaria.

G4 - Capacidad para procesar información técnica y científica, utilizando los conocimientos adquiridos como base para poder ser originales en el desarrollo y aplicación de ideas.

G5 - Capacidad para transmitir información correctamente de forma oral y escrita, desarrollando habilidades para comunicarse y redactar informes.

G6 - Capacidad para aprender de forma autónoma y desarrollar nuevos conocimientos y técnicas especializadas, adecuadas para el desarrollo profesional y/o investigador.



G7 - Desarrollar capacidades investigadoras: objetividad, crítica constructiva, discusión razonada de hechos y datos, establecimiento de conclusiones, etc.
G8 - Capacidad de manejo de las fuentes bibliográficas y de información relacionadas con el campo de los alimentos y la alimentación.
G9 - Compromiso con la ética profesional.
G10 - Reconocer la importancia del desarrollo de una sensibilidad hacia temas medioambientales.

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

CE3 - Conocer y manejar la metodología que permite evaluar la calidad y seguridad de los alimentos y la alimentación.
CE5 - Adquirir conocimientos sobre la gestión de calidad y seguridad alimentaria para su aplicación en la industria alimentaria.
CE8 - Conocer y aplicar métodos estadísticos para manejar la información propia de análisis químicos, físicos, bioquímicos, sensoriales y nutricionales.
CE10 - Evaluar interpretar y resumir datos experimentales para resolver problemas específicos a los alimentos y de la industria Alimentaria.

10. Programa de la asignatura

10.1- Objetivos docentes
Objetivos docentes 1. Comprender la necesidad de una metodología de experimentación. 2. Comprender los fundamentos de los métodos de regresión de dos y tres vías. 3. 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. 4. Construir modelos altamente predictivos. 5. Conocer las posibilidades cuantitativas de la instrumentación acoplada mediante la calibración multivía. 6. Evaluar en qué casos los métodos multivía pueden ser de utilidad. Identificar los métodos existentes. 7. Manejar las señales de orden dos o superior para las tecnologías analíticas de proceso. 8. Plantear el modelo adecuado a cada diseño experimental que explique las relaciones funcionales entre los factores y las respuestas. 9. Realizar el plan experimental pertinente en cada caso analizado. 10. Detectar y cuantificar la influencia de factores en una o varias respuestas experimentales. 11. Analizar la significación de factores experimentales en el dominio analizado. 12. Manejar diseños eficientes. Utilizar la secuencialidad. Bloqueo. 13. Optimizar superficies de respuesta.



14. Manejar las funciones de deseabilidad en el contexto del análisis químico, en un proceso y en la fabricación de productos en el campo alimentario.

15. Buscar condiciones experimentales óptimas en problemas de mezclas con y sin restricciones.

10.2- Unidades docentes (Bloques de contenidos)

Reconocimiento de pautas

1. Técnicas exploratorias multivariantes

Datos multivariantes: variables, objetos. Preprocesado de datos multivariantes.

Componentes principales. Interpretabilidad de las componentes. Aplicaciones en la detección de fraudes alimentarios.

2. Clasificación y modelado multivariante de categorías

Técnicas basadas en normalidad multivariante (Análisis discriminante lineal, LDA). Modelado basado en componentes principales (SIMCA). Poder modelante y poder discriminante de las variables.

Sensibilidad y especificidad de modelos.

Aplicaciones en el campo medioambiental y agroalimentario. Tipificación de productos. Construcción de modelos con alta sensibilidad y especificidad para controlar falsas conformidades y falsas no conformidades.

3. Técnicas de regresión multivariante

Regresión multivariante por mínimos cuadrados. Problemas de correlación y colinealidad en grandes tablas de datos. Modelos de regresión basados en componentes principales (PCR) o por mínimos cuadrados parciales (PLS).

Aplicación a datos procedentes de técnicas espectroscópicas: Espectroscopia NIR y MIR, espectroscopia molecular ultravioleta-visible, fluorescencia molecular de excitación y/o emisión.

Introducción del análisis de datos de tres o más vías y a la ventaja de orden dos cuando se usa descomposición factorial mediante el análisis factorial paralelo (PARAFAC), aplicaciones a datos de GC-MS y nariz electrónica.

Introducción a los métodos de modelado basados en variables latentes (PLS-CM).

Curvas de riesgo y evaluación de las probabilidades de falsa no conformidad y falsa conformidad con datos multivariantes con variables continuas y/o sensoriales.

Metodología para la experimentación

4. Análisis de la varianza

Análisis de la varianza (ANOVA) de uno o varios factores y sus interacciones. ANOVAs anidados.

5. Ensayos hedónicos

Organización de los ensayos. Tipos de ensayos. Interpretación estadística. Análisis de consenso. Diferencias interindividuales.



6. Diseño de experimentos

Modelo matemático de un diseño. Matriz de experiencias. Plan experimental.

Validación de los modelos. Efectos. Factores. Dominio experimental.

Diseños de cribado para la selección de factores.

Diseños factoriales. Aplicaciones industriales y analíticas.

Búsqueda de óptimos mediante superficies de respuesta. Método del camino óptimo.

Optimización de varias respuestas simultáneamente, función de deseabilidad y técnicas multicriterio. Aplicaciones a la optimización de condiciones experimentales y respuestas físico-químicas y/o sensoriales.

introducción a los problemas de mezclas en productos industriales, alimentarios y en el laboratorio.

10.3- Bibliografía

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

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

Brown, S.E., Tauler, R., Walczak, B. (Eds), (2020) Comprehensive Chemometrics. Chemical and Biochemical data analysis., Segunda edición, Elsevier,

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

Granato D., Ares G. (editors), (2014) Mathematical and Statistical Methods in Food Science and Technology, Wiley- Blackwell,

Guardia M. de la, González A. (editors), (2014) Food Protected Designation of Origin. Methodologies and Applications , Elsevier B.V.,

Lea P., Naes T., Rodbotten M., (1998) Analysis of variance for Sensory Data, John Wiley & Sons. Ltd.,

Marini, F. (Editor), (2013) Chemometrics in Food Chemistry, Elsevier,

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

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

10.4- Acceso a la Bibliografía Recomendada desde Leganto

https://leganto.ubu.es/leganto/public/34BUC_UBU/lists?courseCode=7441&auth=SAML



11. Metodología de enseñanza y aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el/la 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, STATGRAPHICS, PARVUS, y otros).

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 exige. Esto permitirá avanzar en la interiorización y construcción del conocimiento científico de modo operativo.

Metodología	Competencia relacionada	Horas presenciales	Horas de trabajo	Total de horas
Clases teóricas	CB6-CB8,G1, G3, G4, G7-G10, CE3, CE5, CE8, CE10	8	12	20
Clases prácticas	CB6-CB8, G1, G3, G4, G7, G9, G10, CE3, CE5, CE8, CE10	18	30	48
Seminarios y tutorías	CB6-CB9, G2, G4, G7-G10, CE3, CE5, CE8, CE10	4	0	4
Realización de trabajos e informes	CB6-CB10,G1,G2,G4-G10, CE3,CE5,CE8,CE10	0	16	16
Presentación y debate de resultados	CB6-CB10,G1,G2,G5,G7-G10, CE3,CE5,CE8,CE10	2	2	4
Pruebas individuales escritas	CB7, G4, G6, G7, G9, G10, CE3, CE5,CE8,CE10	4	4	8
Total		36	64	100



12. 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, excepto la "participación en seminarios, tutorías y otras actividades presenciales" dado su carácter no recuperable.

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

Si el estudiante no superase alguno de los mínimos mencionados, la calificación global de la asignatura será la media aritmética ponderada de las calificaciones obtenidas en las diferentes pruebas de evaluación, salvo que ésta sea superior a 4,9 en cuyo caso la calificación global será 4,9.

El sistema de evaluación para estudiantes de intercambio será modificado en el supuesto de que los calendarios académicos de las universidades de origen y de destino no sean coincidentes.

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 presenciales e individuales	30 %	30 %
Realización de trabajos y presentación de informes (en forma oral o escrita)	30 %	30 %
Resolución de ejercicios y casos prácticos	30 %	30 %
Participación en seminarios, tutorías y otras actividades presenciales	10 %	10 %
Total	100 %	100 %



Evaluación excepcional:

Los alumnos deberán solicitar por escrito a la Decana de la Facultad de Ciencias la posibilidad de acogerse a la "evaluación excepcional" (Reglamento de Evaluación de la UBU).

En la misma fecha y hora que las convocatorias no excepcionales, el estudiante deberá realizar pruebas presenciales individuales (requiriéndose un mínimo de 4 sobre 10 en cada una de ellas) 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 %).

La calificación requerida para aprobar será de cinco sobre diez.

13. 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.

14. Calendarios y horarios:

Los que establezca la Facultad, que se encuentran publicados en la hoja Web del título.

15. Idioma en que se imparte:

Español (asignatura impartida como English Friendly)