



UNIVERSIDAD DE BURGOS

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA, DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS Y COMPUTACIÓN

GUÍA DOCENTE 2023-2024

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

7481

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

Departamento de Química, Departamento de Matemáticas y Computación

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

Ana Herrero, María Sagrario Sánchez

3.b Coordinador/a de la asignatura

María Sagrario Sánchez Pastor

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/la estudiante al cursar la asignatura

Máster en Química Avanzada: 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-quimica-avanzada/informacion-basica/objetivos-y-competencias>

COMPETENCIAS 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.

COMPETENCIAS 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 TRANSVERSALES

CT1.- Reconocer la importancia del compromiso ético con los derechos humanos, los principios de igualdad de oportunidades y la diversidad de sociedades y culturas, con el consiguiente fomento de actitudes de respeto y tolerancia, atendiendo tanto la



igualdad entre hombres y mujeres, como la accesibilidad universal de las personas con discapacidad.

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.

CE5.- Tener la capacidad para proyectar y optimizar experimentos, disminuyendo costes y tiempo, manteniendo la calidad de la información, el respeto al medio ambiente y a las normativas de calidad y seguridad.

CE6.- Haber desarrollado la autonomía suficiente para participar en proyectos relacionados con la Química, en contextos interdisciplinares 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.

CE8.- Saber aplicar sus conocimientos de los procesos químicos tanto en las actividades industriales, como en el laboratorio a problemas nuevos de carácter multidisciplinar.

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.
13. Abordar problemas de optimización en mezclas con y sin restricciones.

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.

9.3- Bibliografía

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

S.D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (Eds), (2020) Comprehensive Chemometrics: Chemical and Biochemical Data Analysis. 2nd Edition. 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. H. Myers, D.C. Montgomery, C.M. Anderson-Cook, (2016) Response Surface Methodology, Fourth, John Wiley & Sons Inc., Hoboken New Jersey, 978-1-118-91601-8,

9.4- Acceso a la Bibliografía Recomendada desde Leganto

https://leganto.ubu.es/leganto/public/34BUC_UBU/lists?courseCode=7481&auth=SAML

10. 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, 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	CB6, CB10 CE1,CE3, CE5,CE6, CE7,CE8	8	16	24
Clases prácticas	CB6, CB7, CG2 CE1,CE3, CE5,CE6, CE7,CE8	24	24	48
Seminarios y tutorías	CB6, CB7,CB10 CE1,CE3, CE5,CE6, CE7,CE8	4	4	8
Realización de trabajos e informes	CB8, CB9, CB10 CG1, CG2, CG5 CE1,CE3, CE5,CE6, CE7,CE8	1	16	17
Presentación y debate de resultados	CB7, CB9 CG6 CE1,CE3, CE5,CE6, CE7,CE8	4	8	12
Pruebas individuales escritas	CB7, CB8, CB9 CG6 CE1,CE3, CE5,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, a excepción de la "participación en seminarios, tutorías y otras actividades presenciales".

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

Evaluación excepcional:

Para aplicar esta modalidad de evaluación es obligatorio la realización de las pruebas presenciales de carácter personal e individual el mismo día y a la misma hora en la que están convocados el resto de los alumnos. Se requiere un mínimo de 4 sobre 10 en la evaluación de los siguientes procedimientos:

Prueba de conocimientos mínimos: 40 %

Prueba de habilidades y destrezas en el laboratorio de cómputo: 40 %

Realización y presentación de trabajos de forma oral y/o escrita: 20 %

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

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.



UNIVERSIDAD DE BURGOS

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA, DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS Y COMPUTACIÓN

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 (asignatura impartida como English Friendly)