

**Proyecto/Guía docente de la asignatura**

<b>Asignatura</b>	Herramientas quimiométricas para el análisis y tratamiento de datos		
<b>Materia</b>	Optativa		
<b>Módulo</b>			
<b>Titulación</b>	Máster Universitario en Técnicas Avanzadas en Química. Análisis y Control de Calidad Químicos		
<b>Plan</b>	623	<b>Código</b>	54598
<b>Periodo de impartición</b>	2º semestre	<b>Tipo/Carácter</b>	Optativa
<b>Nivel/Ciclo</b>	Posgrado	<b>Curso</b>	
<b>Créditos ECTS</b>	3		
<b>Lengua en que se imparte</b>	Español		
<b>Profesor/es responsable/s</b>	María del Sol Vega Alegre / Juan José Jiménez Sevilla		
<b>Datos de contacto (E-mail, teléfono...)</b>	<a href="mailto:solvega@qa.uva.es">solvega@qa.uva.es</a> , <a href="mailto:jjimenez@qa.uva.es">jjimenez@qa.uva.es</a>		
<b>Departamento</b>	Química Analítica		



## 1. Situación / Sentido de la Asignatura

---

### 1.1 Contextualización

---

La Quimiometría es la disciplina científica que extrae información de sistemas químicos mediante tratamiento de los datos que proporcionan. Para ello utiliza herramientas matemáticas, estadísticas y de lógica formal para (a) diseñar y optimizar los experimentos de medida que darán origen a los datos, (b) procesar los datos para generar información química de calidad, y (c) obtener conocimientos sobre sistemas químicos.

Así, la Quimiometría ayuda, por un lado, a la adquisición de datos válidos mediante la optimización de parámetros experimentales, diseño de experimentos, calibración y procesamiento de señales, y usa métodos matemáticos para obtener información a partir de dichos datos (estadística, reconocimiento de patrones, modelado...).

La Quimiometría y sus herramientas tienen una gran aplicación en todas las disciplinas en las que se genera una gran cantidad de información química: química analítica, química clínica, bioquímica y ciencias biomédicas, medioambiente, geoquímica, hidroquímica, etc.

Con esta asignatura se pretende que el alumno adquiera los conocimientos necesarios para poder aplicar las herramientas e interpretar los resultados, y que sea consciente de la utilidad de la Quimiometría en campos científicos y tecnológicos diversos, para generar información de calidad, útil y relevante, que le ayudará en la toma de decisiones en su futura actividad profesional.

### 1.2 Relación con otras materias

---

La asignatura se presenta como un complemento imprescindible a los conocimientos del químico en la actualidad, de manera que pueda (1) dar validez estadística a sus afirmaciones y propuestas; (2) encontrar los parámetros más influyentes sobre los procesos que realiza y encontrar los valores más adecuados de dichos parámetros; (3) procesar las señales instrumentales para mejorar la relación señal/ruido de datos experimentales; (4) aplicar modelos lineales y no lineales para explicar procesos químicos; (5) Visualizar información multivariante de una forma comprensible mediante análisis de exploratorio y reconocimiento de pautas.

### 1.3 Prerrequisitos

---

Los genéricos de la titulación.

Los alumnos que hayan accedido al máster desde titulaciones de grado o licenciatura en Química y otras ramas de ciencias o ingeniería no precisan ningún complemento adicional de formación.



## 2. Competencias

---

### 2.1 Generales

---

**G1.- Conocimiento del método científico.**

Conocer el método científico dentro de las ciencias experimentales, en particular en el ámbito de la Química, formulando modelos e hipótesis de trabajo relevantes y planificando el análisis en relación con dichas hipótesis y la discusión de las conclusiones, de modo que se pueda avanzar en el conocimiento científico.

**G2.- Competencia para aplicar los conocimientos adquiridos.**

Es la capacidad para aplicar los conocimientos técnicos adquiridos, de forma coherente y profesional, sobre todo en contextos novedosos o en constante renovación, que impliquen la realización de una actividad química

**G3.- Capacidad crítica, de análisis y síntesis, y capacidad de interpretación.**

Ser capaz de emitir juicios críticos sobre propuestas, hipótesis y validez científica de las conclusiones, así como sintetizar propuestas y resultados dentro del ámbito de la química.

**G4.- Competencias metodológicas.**

Es la capacidad para elegir la metodología más adecuada para el desarrollo de la investigación y resolución de un problema concreto, adaptándola al contexto en el que se éste se ha originado.

**G5.- Capacidad para valorar la originalidad y creatividad.**

Es la competencia para reconocer la originalidad en la concepción, formulación y resolución de problemas, en el ámbito de la investigación química y científico-tecnológica en general.

**G6.- Capacidades de comunicación.**

Ser capaz de presentar de forma oral y escrita, ante públicos especializados o no, resultados avanzados de investigación química, considerando antecedentes, hipótesis de trabajo, resultados y conclusiones

**G7.- Capacidad de trabajo en equipo.**

Capacidad para el desarrollo de actividades químicas, supervisadas o autónomas, al servicio de un proyecto de trabajo común, que puede ser multidisciplinar.

**G8.- Capacidad para el uso de las nuevas tecnologías.**

Adquirir destrezas generales en el uso de las nuevas tecnologías en el ámbito de la química, que le permiten la utilización de las herramientas informáticas disponibles más importantes en el campo científico-tecnológico.

**G9.- Desarrollar el interés por la formación permanente.**

Promover un interés permanente para ampliar conocimientos y el desarrollo de un perfil profesional específico, mediante el estudio, la reflexión y la investigación.

**G10.- Capacidad de aprendizaje autónomo.**

Adquirir las destrezas necesarias para el aprendizaje autónomo en el ámbito de la Química, reconociendo las fuentes de conocimiento para dicho aprendizaje y su utilización, y motivando el aprendizaje a lo largo de la vida, en el ámbito de la química

### 2.2 Específicas

---

**E1.- Adquisición de destrezas técnicas generales en el ámbito de una o varias disciplinas químicas.**

Comprende esta competencia la capacidad de utilización de forma profesional del lenguaje y de las técnicas avanzadas propias de algunas de las especialidades de la Química, para favorecer la interpretación fluida de las fuentes especializadas de dichas disciplinas y la formulación adecuada de nuevos problemas.

**E2.- Adquisición de destrezas técnicas generales para el estudio y resolución de problemas analíticos.**



Comprende esta competencia la capacidad de elección y utilización de forma profesional de las técnicas avanzadas propias de algunas de las especialidades de la Química, para favorecer el estudio y en su caso resolución de problemas analíticos.

**E3.- Capacidad para iniciarse en la investigación en Química.**

El alumno del Máster adquirirá competencias suficientes que le permitan iniciar un proyecto de investigación en alguna de las áreas de conocimiento de la Química, de forma que pueda integrarse en las líneas de investigación de un Programa de Doctorado de la Universidad de Valladolid., o en un departamento de I+D+i de una empresa pública o privada

**E5.- Capacidad de aplicar y adaptar los modelos teóricos y las técnicas específicas tanto a problemas abiertos en su línea de especialización, como a problemas provenientes de otros ámbitos ya sean científicos o técnicos.**

Competencia para adaptar los modelos teóricos químicos para el estudio de problemas relacionados con la química o provenientes de otros campos científico-tecnológicos.

**E10.-Capacidad de conocer y aplicar herramientas para la validación de procedimientos y el control de calidad.**

Esta competencia comprende el conocimiento y aplicación de herramientas matemáticas y estadísticas para la validación de procedimientos y el control de calidad de los resultados.

**E17.- Capacidad de conocer y aplicar las herramientas, procedimientos y normas utilizados en control de calidad**

Esta competencia implica el conocimiento de las herramientas quimiométricas avanzadas, de las buenas prácticas de laboratorio o de management y de las normas, directrices y procedimientos que permitan implantar sistemas de calidad y acreditar laboratorios según las actuales directrices de la ISO o de otros organismos reguladores, como ICH, Farmacopea, USP, etc.



### 3. Objetivos

- Conocer los procesos de filtrado y suavizado de señales
- Conocer las posibilidades de los modelos lineales y no lineales.
- Conocer el fundamento y aplicaciones de la regresión por mínimos cuadrados parciales.
- Describir y utilizar las herramientas quimiométricas multivariantes para extraer la información relevante de un conjunto de datos
- Adquirir una visión global del conjunto de estrategias quimiométricas disponibles y de las relaciones existentes entre los distintos procedimientos
- Ser capaz de seccionar y aplicar las herramientas quimiométricas más adecuadas en los distintos ámbitos de actividad.
- Adquirir la capacidad para afrontar un problema determinado a través de una serie de pasos coordinados: análisis del problema, planificación de los experimentos, análisis de los datos, aplicación de métodos de clasificación y/o regresión.
- Familiarizarse con la utilización de software quimiométrico, de forma que pueda utilizarse autónomamente en futuras aplicaciones propias.





#### 4. Contenidos y/o bloques temáticos

##### Bloque 1: "Nombre del Bloque"

Carga de trabajo en créditos ECTS: 

##### a. Contextualización y justificación

La asignatura se ha estructurado en un bloque único.

##### b. Objetivos de aprendizaje

- Conocer los procesos de filtrado y suavizado de señales
- Conocer las posibilidades de los modelos lineales y no lineales.
- Conocer el fundamento y aplicaciones de la regresión por mínimos cuadrados parciales.
- Describir y utilizar las herramientas quimiométricas multivariantes para extraer la información relevante de un conjunto de datos
- Adquirir una visión global del conjunto de estrategias quimiométricas disponibles y de las relaciones existentes entre los distintos procedimientos
- Ser capaz de seccionar y aplicar las herramientas quimiométricas más adecuadas en los distintos ámbitos de actividad.
- Adquirir la capacidad para afrontar un problema determinado a través de una serie de pasos coordinados: análisis del problema, planificación de los experimentos, análisis de los datos, aplicación de métodos de clasificación y/o regresión.
- Familiarizarse con la utilización de software quimiométrico, de forma que pueda utilizarse autónomamente en futuras aplicaciones propias.

##### c. Contenidos

###### Tema 1. Procesado de señales

Introducción. Tipos de procesado de señales. Transformadas de Fourier continua y discreta. Métodos de filtrado. Métodos de suavizado. Convolución y deconvolución de señales.

###### Tema 2. Métodos de ajuste. Calibración y regresión

Introducción. Regresión lineal simple. Estimación de los parámetros. Regresión multivariada. Aplicaciones analíticas: análisis multicomponente y calibración multivariada. Métodos de ajuste no lineal.

###### Tema 3. Métodos multivariantes I. Reducción de dimensiones.

Introducción. Análisis en componentes principales. Interpretación geométrica. Elección del número de componentes. Interpretación de resultados. Calibración multivariante basada en regresión sobre componentes principales y en regresión por mínimos cuadrados parciales.

###### Tema 4. Métodos multivariantes II. Reconocimiento de pautas.

Introducción. Reconocimiento no supervisado de pautas. Análisis clúster. Medidas de distancia y similitud. Reconocimiento no supervisado de pautas. Análisis discriminante. Método de los k vecinos más cercanos. Método S.I.M.C.A.



#### **d. Métodos docentes**

---

Se combinarán diferentes estrategias docentes para conseguir los objetivos de aprendizaje:

1. Exposición y explicación de contenidos por parte de un profesor.
2. Resolución de ejercicios, planteamiento/resolución de problemas y exposición/discusión de casos por parte de un profesor con la participación activa de los estudiantes. Se realizará en aula de informática. Los ejercicios se intercalarán con la teoría para ilustrar los diferentes contenidos.
3. Realización de ejercicios en el aula de informática por los estudiantes bajo la supervisión directa de un profesor.
4. Preparación por los estudiantes de ejercicios similares a los realizados en el aula, que serán revisados por el profesor.
5. Trabajo personal del estudiante, necesario para adquirir las competencias de la materia y asimilar los conocimientos expuestos en las sesiones presenciales.
6. Pruebas orales y/o escritas realizadas durante el periodo lectivo de una asignatura o una vez finalizada la misma.

Las clases, tanto teóricas como de resolución de problemas, se impartirán en aula de informática. La plataforma MOODLE se utilizará para facilitar el material de la asignatura a los alumnos, para entregar las tareas en formato electrónico, para el intercambio de opiniones y resolución de dudas, etc. Los alumnos accederán a la misma utilizando las cuentas y claves que, de forma automática, les proporciona la Universidad de Valladolid.

#### **e. Plan de trabajo**

---

#### **f. Evaluación**

---

La evaluación de los alumnos tendrá en cuenta: a) Seguimiento continuo, evaluación de problemas, trabajos u otras actividades (40%); b) Evaluación de conocimientos por medio de examen (30%); Evaluación de conocimientos prácticos (30%).

#### **g. Bibliografía básica**

---

- Miller, J.N., Miller, J.C. (2010). *Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry*. 6ª ed., Pearson Education.
- Massart, D.L., Vandeginste, B.G.M., Deming, S.N., Michotte, Y, Kaufman, L (1988). *Chemometrics: a Textbook*, Elsevier, Amsterdam.
- Massart, D.L., Vandeginste, B.G.M., Buydens, L.M.C., de Jong, S., Smeyers-Verbeke. P.J. (1997). *Handbook of Chemometrics and Qualimetrics; Part A and Part B, in Data Handling in Science and Technology*, Elsevier, Amsterdam.

#### **h. Bibliografía complementaria**

---

- Brereton. R.G. (2003) *Chemometrics. Data analysis for the laboratory and chemical plant*. Wiley
- Ellison, S.L.R., Barwick, V.J., Duguid Farrant, T.J. (2009). *Practical Statistics for the Analytical Scientist. A Bench Guide*, 2nd Edition, RSC Publishing.



Gemperline, P. (2006). Practical Guide to Chemometrics. CRC Press, Boca Raton, 2006.

Mongay Fernández, C. (2005). Quimiometría, Universidad de Valencia.

Mullins, E. (2003). Statistics for the quality control chemistry laboratory. Royal Society of Chemistry.

Varmuza, K., Filzmoser, P. (2009). Introduction to multivariate statistical analysis in chemometric, CRC Press, Boca Raton, FL.

### **i. Recursos necesarios**

Las clases de teoría y problema se desarrollarán en un aula de informática. Se empleará Excel y software estadístico para la resolución de ejercicios. La plataforma Moodle permitirá el intercambio de materiales, ejercicios y resolución de dudas.

### **j. Temporalización**

CARGA ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO
3.0	2º cuatrimestre

## **5. Métodos docentes y principios metodológicos**



**6. Tabla de dedicación del estudiante a la asignatura**

ACTIVIDADES PRESENCIALES	HORAS	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORAS
Clases teóricas	10	Preparación y estudio personal de los contenidos teóricos	20
Clases prácticas	14	Preparación y resolución de ejercicios, problemas, presentaciones...	10
Seminarios	4	Estudio y preparación de exámenes	15
Realización de exámenes	2		
Total presencial	<b>30</b>	<b>Total no presencial</b>	<b>45</b>

**7. Sistema y características de la evaluación**

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Evaluación continua (resolución de problemas en aula, resolución de ejercicios propuestos, trabajos...)	70%	Se debe participar al menos en el 70% de las actividades propuestas.
Examen final	30%	

**CRITERIOS DE CALIFICACIÓN**

- **Convocatoria ordinaria:**
  - Evaluación continua (70%)
  - Examen final (30%)
- **Convocatoria extraordinaria:**
  - Examen final (100%)

**8. Consideraciones finales**