



## PRESENTACIÓN

### Análisis de datos en química

- **Breve descripción de la asignatura:** (1) Tratamiento de datos en la caracterización química de materiales (biológicos, poliméricos, metálicos, cerámicos, de construcción, patrimonio, de interés medioambiental, etc.) y (2) diseño y modelado de procesos físico-químicos. En el primer bloque se podrán cubrir aspectos como: incertidumbre y validación en metodología analítica, procesamiento de espectros, algoritmos de búsqueda en bases de datos, automatización para la adquisición de datos, análisis de imagen en química, etc. En el segundo bloque se abordará la planificación y optimización de los diseños experimentales y el ajuste a los modelos.
- **Carácter:** Optativa
- **ECTS:** 3 ECTS (75 horas)
- **Curso y cuatrimestre:** Único, 2º cuatrimestre.
- **Idioma:** Español
- **Título:** Máster en Ciencia de Datos para Ciencias Experimentales
- **Módulo y materia de la asignatura:** Optativo/Optativas
- **Profesor responsable de la asignatura:** José Ramón Isasi Allica
- **Profesores:** Adrián Durán, José Ramón Isasi, Iñigo Navarro, Fco. Javier Peñas, Itziar Vélaz.
- **Horario:** seminarios de 2 h, (horario a convenir para alguna de las sesiones).  
[Enlace a horarios Máster.](#)
- **Aula:** 1 (edificio Los Castaños)

## RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Competencias)

RAO4 Analizar estadística y computacionalmente datos sobre caracterización de materiales y diseñar o modelar procesos físico-químicos y/o biológicos.

## PROGRAMA

*Seminarios en los que se abordarán los siguientes temas:*

1. Evaluación de incertidumbre de un proceso analítico.
2. Selección y validación de métodos analíticos.
3. Procesamiento de espectros: deconvoluciones, líneas base, suavizados.
4. Procesamiento de espectros: metodologías de ajuste de curvas.
5. Búsqueda e identificación en bases de datos.
6. Automatización para la adquisición de datos.
7. Análisis de imagen en química.
8. Determinaciones cuantitativas y semicuantitativas en mezclas.



9. Espectroscopías de correlación bidimensional.

***Además, se utilizarán casos prácticos basados en algunas de las siguientes técnicas:***

**Caracterización en estado sólido:** difracción de rayos X, fluorescencia de rayos X, microscopía electrónica, análisis térmico, espectroscopía infrarroja.

**Caracterización en disolución:** dispersión de luz, dispersión de neutrones, resonancia magnética nuclear, espectroscopía molecular, métodos cromatográficos.

---

***Presentaciones y seminarios (método del caso) referidos al diseño experimental y modelado:***

1. Bases teóricas del diseño factorial de experimentos. Propuesta práctica.
2. Estudio de casos (bioequivalencia de formas farmacéuticas, procesado de biopolímeros, materiales bactericidas).
3. Análisis y modelado de procesos (adsorción de contaminantes, escaldado de alimentos, fotodegradación, etc.)

## ACTIVIDADES FORMATIVAS

Asignatura de 3 ECTS que equivalen a **75 horas**.

### 1. Actividades presenciales (30 horas)

- Clases teórico-prácticas y/o seminarios distribuidos en 14 sesiones (28 horas)
- Tutorías (2 horas)
- Examen final opcional (1 hora)

### 2. Actividades no presenciales (45 horas)

- Trabajo autónomo y/o en grupo del alumno (45 horas)

## EVALUACIÓN

- Presencia activa (15%): participación en las clases y seminarios
- Examen (opcional): el examen constará en una prueba escrita con cuestiones breves y/o una presentación oral voluntaria para subir nota.
- Resolución de casos prácticos en aula (45%): en cada capítulo/seminario se planteará un breve ejercicio sobre los contenidos presentados.
- Presentación de trabajos escritos (40%): cada alumno aplicará los conocimientos adquiridos en el máster para analizar los problemas planteados.

Convocatoria extraordinaria: examen con cuestiones breves (70%) y trabajo escrito (30%)

Calificaciones: SS, AP, NOT, SOB, MH, en escala de 0-10

## HORARIOS DE ATENCIÓN

Dr. José Ramón Isasi Allica

Jueves de 11:00 a 13:00, o concertando cita.



Universidad  
de Navarra

Edificio de Investigación. Despacho 1170.

Dirección-e: jrisasi@unav.es

## BIBLIOGRAFÍA

### Bibliografía básica

- Dubrovkin, J. "Mathematical Processing of Spectral Data in Analytical Chemistry: a guide to error analysis". Cambridge Scholars Publ, 2018. [Localizado en la Biblioteca](#)
- Maeder, M., Neuhold, Y.-M., "Practical Data Analysis in Chemistry". Elsevier Science, 2007. [Localizado en la Biblioteca](#)
- Wehrens, R., Murrell, P. (ed.) "[Uses of R in Chemistry](#)". R News 6/3, 2006.

### Bibliografía complementaria

- O'Haver, T. "A Pragmatic Introduction to Signal Processing with applications in scientific measurement" [[Recurso electrónico](#)], accesible 02/06/2025.