Universidad de Navarra

Análisis de datos en química (MC2)

Guía docente 2023-24

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 semestre**: Único, 2º semestre.
- **Idioma**: Español
- **Título**: Máster en Métodos Computacionales en Ciencias
- **Módulo y materia de la asignatura**: Optativo/Optativas
- **Profesor responsable de la asignatura**: José Ramón Isasi Allica
- **Profesores**: Adrián Durán, Iñigo Navarro, Carolina Santamaría, Fco. Javier Peñas, Itziar Vélaz.
- **Horario**: seminario semanal de 3h, horario a convenir
- **Aula**: 1 (edificio Los Castaños)

COMPETENCIAS

COMPETENCIAS BÁSICAS

CB6. Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo 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.

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

CG3. Conocer los principales problemas que se presentan en la adquisición y tratamiento de datos experimentales y cómo darles respuesta.

CG4. Comunicar tanto de manera oral como escrita un tema o datos de investigación en el área de las ciencias experimentales.

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

CE5. Aplicar los métodos computacionales de procesamiento de datos a un problema científico particular de la disciplina de interés para el estudiante.

Universidad de Navarra

CE6. Diseñar un experimento científico para que sea rico en información, recogiendo gran cantidad de datos de manera estructurada que faciliten su procesamiento posterior.

CE8. Adquirir datos (bien en el laboratorio, o bien mediante minería on-line), organizarlos, filtrarlos, procesarlos, representarlos y refinarlos.

CE9. Extraer información de los datos con técnicas computacionales siguiendo un método científico.

CE10. Presentar los datos experimentales y la información científica de manera que se comuniquen de manera eficiente y fidedigna.

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS DE OPTATIVIDAD

CEOP13. Aplicar los métodos computacionales y estadísticos al análisis de datos experimentales complejos obtenidos a partir de técnicas instrumentales.

CEOP14. Conocer el efecto de las variables que influyen en procesos físico-químico-biológicos mediante simulaciones y modelización.

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.

Para ello, 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.

Universidad de Navarra

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 9 sesiones (27 horas)
- Tutorías (2 horas)
- Examen final (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 (30%): el examen constará de varias preguntas de elección múltiple y/o de respuesta breve
- Resolución de casos prácticos (25%): en cada capítulo/seminario se planteará un breve ejercicio sobre los contenidos presentados.
- Presentación de trabajos escritos (30%): cada alumno seleccionará la técnica de su interés y aplicará los conocimientos adquiridos en el máster para analizar un problema.

Convocatoria extraordinaria: examen (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 9:00 a 11:00 h. y de 16:00 a 18:00, o concertando cita.

Edificio de Investigación. Despacho 0110.

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). Disponible en la Biblioteca
- Maeder, M., Neuhold, Y.-M., "Practical Data Analysis in Chemistry." Elsevier Science (2007). Disponible 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 21/1/2021.