



PRESENTACIÓN

Breve descripción:

Esta asignatura se estructura en tres partes eminentemente prácticas en cuanto a manejo y obtención de datos. La primera se centrará en la planificación de un diseño experimental para la obtención de un modelo. La segunda, buscará optimizar el diseño experimental en base a datos experimentales ya obtenidos. La tercera parte se centrará en el proceso creativo del ajuste de datos. Concretamente:

Parte I - Se estudiarán la bases teóricas y prácticas de un diseño factorial de experimentos en el que se elegirán distintas variables para ejecutar adecuadamente la investigación.

Parte II - Se pretende aplicar el tratamiento estadístico aprendido en el módulo obligatorio a casos reales mediante la metodología del método del caso y la dinámica de grupos. Se planteará el caso a los alumnos y se proporcionarán los datos experimentales correspondientes para, a través del análisis y la discusión, llegar a plantear diseños experimentales correctos y extraer conclusiones concretas.

Parte III - El proceso creativo en el ajuste de datos: El modelado de procesos proporciona un valor añadido a las publicaciones. A través del análisis de un número de casos variados, se aborda el proceso creativo seguido en el ajuste de datos experimentales cuando las ecuaciones que relacionan los datos entre sí no están bien definidas o directamente se desconocen.

- **Titulación:** Máster Universitario Métodos Computacionales en Ciencias
- **Módulo/Materia:**
- **ECTS:** 3
- **Curso, semestre:** curso 1º, segundo semestre
- **Carácter:** Optativa
- **Profesorado:** Itziar Vélaz Rivas (responsable) y Francisco Javier Peñas Esteban
- **Idioma:** castellano, se requieren conocimientos de inglés
- **Aula, Horario:** [Calendario del Máster](#)

COMPETENCIAS

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

PROGRAMA

Parte I:

- Presentación: Explicación de las bases teóricas de un diseño factorial de experimentos.
- Propuesta práctica: Se analizarán casos prácticos propuestos para su resolución.

Parte II: Se discutirán 3 tipos de casos:

1. Estudios de bioequivalencia de formas farmacéuticas
2. Influencia de variables como temperatura, contenido, ciclos de congelado/descongelado, etc., en la preparación de geles de quitosano
3. Estudios de capacidad bactericida de nanopartículas en films para el envasado de alimentos

Parte III: Presentación. Conceptos básicos de SOLVER. Ejemplos sencillos.

Análisis práctico de casos diversos como (*): adsorción de contaminantes, biometanización de residuos, escaldado de alimentos, fotodegradación catalítica, hinchamiento en hidrogeles, liberación controlada de fármacos, sobrecargas en biorreactores, transferencia de oxígeno en reactores, velocidades terminales de partícula.

- (*) Todas las sesiones se imparten en la sala de ordenadores o centro de cálculo. Alternativamente en aula normal, pero cada uno con su equipo.

ACTIVIDADES FORMATIVAS

En cada una de las partes se llevarán a cabo las siguientes actividades formativas:

- Clases teóricas (4h)
- Seminarios de discusión y resolución en el aula (20h)
- Exposición oral ante el grupo (6h)



Universidad
de Navarra

- **Equipamiento**

Se requiere traer ordenador portátil con Excel.

- **Distribución horaria**

- 5 sesiones de 2h cada una en cada uno de los módulos.

EVALUACIÓN

CONVOCATORIAS ORDINARIA Y EXTRAORDINARIA

La evaluación se realizará de manera continua; para la valoración de la nota final se tendrán en cuenta la asistencia a las sesiones, el análisis y discusión de los casos en el aula y el informe, exposición final y/o resolución de un caso práctico encargado a los alumnos.

Cada una de las partes de la asignatura tendrá el mismo peso en la nota final, es decir, 1/3.

NOTA IMPORTANTE:

- Si entre el alumnado hay algún estudiante con necesidades educativas especiales, tanto las actividades formativas como la evaluación serán adaptadas a sus requerimientos, todo ello intentando mantener la calidad en la enseñanza.

HORARIOS DE ATENCIÓN

Los profesores estarán disponibles para aquellas cuestiones que los alumnos quieran o necesiten plantear.

Se puede concertar cita previa vía e-mail:

Dra. Itziar Vélaz Rivas, despacho 1-171 (itzvelaz@unav.es)

Dr. Javier Peñas Esteban, despacho 1-231 (jpesteban@unav.es)

Planta 1. Edificio de Investigación

Departamento de Química. Facultad de Ciencias

BIBLIOGRAFÍA

La bibliografía se basará en artículos seleccionados que puedan ser útiles para el planteamiento y resolución de los casos, por estar relacionados con los mismos. Por citar algunos:

-Estudios de bioequivalencia y especialidades farmacéuticas genéricas. Montpart, E., Martín, MP. *Offarm* 2002, 21 (1): 88-92. Localízalo en la Biblioteca

-Hydrogel matrices containing single and mixed natural cyclodextrins. Mechanisms of drug release. Machín, R; Isasi, JR; Vélaz, I. *European Polymer Journal* 2013, 49: 3912-3920. [Localízalo en la Biblioteca](#)

-Cyclodextrin hydrogels as potential drug delivery systems. Machín, R; Isasi, JR; Vélaz, I. *Carbohydrate Polymers* 2012, 87: 2024-2030 [Localízalo en la Biblioteca](#)



Universidad
de Navarra

-Estudios de bioequivalencia: la necesidad de establecer la fiabilidad de los medicamentos genéricos. Laosa, O.; Guerra, P.; López-Durán, JR; Mosquera, B.; Frías, J. *Rev Peru Med Exp Salud Pública* 2009, 26(4): 553-62. [Localízalo en la Biblioteca](#)

-Preparation and Characterization of Polymer Composite Materials Based on PLA/TiO₂ for Antibacterial Packaging. Segura González, EA; Olmos, D; Lorente MA; Vélaz, I; González-Benito, J. *Polymers* 2018, 10: 1365- 1379; doi:10.3390/polym10121365 [Localízalo en la Biblioteca](#)

-Effect of freeze-thawing conditions for preparation of chitosan-poly (vinylalcohol) hydrogels and drug release studies. Figueroa-Pizano, MD; Vélaz, I; Peñas, FJ; Zavala-Rivera, P; Rosas-Durazo, AJ; Maldonado-Arce, A; Martínez-Barbosa, ME. *Carbohydrate Polymers* 2018, 195: 476–485 [Localízalo en la Biblioteca](#)

- Fotocatálisis heterogénea con TiO₂ para el tratamiento de desechos líquidos con presencia del indicador verde de bromocresol. Guarín Llanes, Carolay Yaneth y Mera Benavides; Adriana Consuelo. *Revista Ingenierías Universidad de Medellín* 2011. [Localízalo en la Biblioteca](#)