



ANÁLISIS DE DATOS EN QUÍMICA

PRESENTACIÓN

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.

- **Titulación:** MÁSTER UNIVERSITARIO EN CIENCIA DE DATOS PARA CIENCIAS EXPERIMENTALES
- **Módulo y materia:** Módulo III Optativo. Materia 3.1. Optativas
- **Carácter:** Optativa
- **ECTS:** 3
- **Curso y semestre:** Curso 1º y semestre 2º
- **Idioma:** Español
- **Profesor responsable de la asignatura:** José Ramón Isasi
- **Otros profesores:** Adrián Durán, Iñigo Navarro, Carolina Santamaría, Fco. Javier Peñas, Itziar Vélaz.
- **Horario y aula:** consultar calendario del máster

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

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

CONTENIDOS

1. Sistemas de instrumentación para adquisición de datos
2. Procesamiento de imágenes mediante técnicas que permitan automatizar procesos
3. Programación avanzada: programación en paralelo y GPU (graphical processing units)
4. Análisis de datos biológicos macroscópicos y/o genético-moleculares
5. Bioinformática estructural: análisis de secuencias de proteínas y proteína/ligando
6. Análisis e interpretación de datos de alto rendimiento
7. Análisis de datos químicos y modelado de procesos
8. Análisis y procesamiento de datos espaciales
9. Aprendizaje automático: métodos bayesianos
10. Redes neuronales profundas

PROGRAMA

(A) Seminarios en los que se abordará alguno de 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.

(B)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 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



Universidad
de Navarra

Facultad de Ciencias

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 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). 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.