

Guía docente de la asignatura

Fecha de aprobación por la Comisión Académica: 17/07/2023

Herramientas para el Análisis de Procesos Químicos (M43/56/4/17)**Máster**

Máster Universitario en Ciencias y Tecnologías Químicas, Khemia

MÓDULO

- Producción, Ensayo y Calidad
- Metodología e Instrumentación

RAMA

Ciencias

CENTRO RESPONSABLE DEL TÍTULO

Escuela Internacional de Posgrado

Semestre

Segundo

Créditos

3

Tipo

Optativa

Tipo de enseñanza

Presencial

PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES

Es recomendable haber cursado previamente la asignatura de:

- QUIMIOMETRÍA.

BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (Según memoria de verificación del Máster)

La tecnología analítica de procesos (PAT): definición y etapas. Antecedentes y situación actual. Analizadores y monitorización de procesos: técnicas analíticas para PAT. Orden de instrumentos de control: datos tensoriales. Diseño de experimentos para optimización de procesos: cribado y modelado. Tratamiento de datos multivariados en PAT: modelos cualitativos y cuantitativos. Aplicaciones en las industrias química, farmacéutica, alimentaria y biotecnología.

COMPETENCIAS**COMPETENCIAS BÁSICAS**

- CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en desarrollo y/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.
- CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- 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

- CG01 - Que los estudiantes sepan asumir las responsabilidades adecuadas en lo que respecta al desarrollo de conocimientos y/o prácticas profesionales

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE10 - Planificar, gestionar y desarrollar proyectos científico-tecnológicos con manejo de información y conocimiento de su transferencia hacia otros sectores.
- CE11 - Conocer las principales herramientas, de naturaleza estadística y computacional, aplicables a la manipulación de datos y a la extracción de la información química valiosa, pero no evidente, contenida en dichos datos

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT04 - Conocimiento y uso de las tecnologías de la información y comunicación (TICs) y de los recursos informáticos (programas, bases de datos, etc.) relativos al ámbito de estudio para adquirir, gestionar y comunicar la información
- CT06 - Trabajo en equipo

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Objetivos)

Al cursar esta materia el alumno será capaz de:

1. Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos.
2. Planificar, diseñar y desarrollar estrategias de monitorización y control de procesos por lotes.
3. Conocer las principales herramientas características de la "Tecnología Analítica de Procesos" (PAT).
4. Conocer los conceptos fundamentales del diseño de experimentos y describir los principales tipos de experimentos diseñados.
5. Diferenciar y aplicar las principales estrategias formales de optimización y establecer la metodología necesaria para su utilización.
6. Conocer y diferenciar los objetivos del desarrollo de métodos basados en el concepto de "Calidad mediante el Diseño" (QbD).
7. Reconocer las principales técnicas analíticas útiles en el control de procesos y las ventajas



- e inconvenientes de cada una.
8. Establecer las relaciones entre el orden de los instrumentos, la dimensionalidad de los datos analíticos que puede suministrar y el nivel de la información que puede extraerse.
 9. Conocer los fundamentos de las principales técnicas quimiométricas y computacionales de tratamiento de datos multivariados.

PROGRAMA DE CONTENIDOS TEÓRICOS Y PRÁCTICOS

TEÓRICO

CONTEXTO EN EL QUE SE DESARROLLA LA ASIGNATURA

La industria química y afines (principalmente la industria farmacéutica y biotecnológica) busca aplicar metodologías que permitan asegurar la calidad de los productos que ofrecen al mercado; el aseguramiento de esta calidad se realiza mediante la determinación de parámetros de calidad a través de ensayos off-line en el producto terminado. Sin embargo, la complejidad de los métodos y la variedad de los mismos retrasa de forma importante la liberación del producto con las consiguientes pérdidas económicas y de competitividad para la empresa.

Como respuesta a esta situación han surgido las iniciativas de Tecnología Analítica de Procesos (PAT) y la Calidad mediante el Diseño (QbD), en las que se fomenta el uso de nuevas tecnologías para asegurar la calidad de los productos terminados, controlando las diferentes etapas del proceso de fabricación, permitiendo obtener un mejor conocimiento del proceso productivo y asegurando con ello la calidad del producto final.

La obtención de conclusiones válidas que facilite la toma de decisiones, a partir de los datos obtenidos en la aplicación de dichas tecnologías analíticas, requiere la aplicación de herramientas quimiométricas de tratamiento de datos multivariados ya que permiten extraer información útil del proceso a partir de los datos tensoriales (vectores o matrices) obtenidos.

TEMARIO TEÓRICO:

- Tema 1. CONSIDERACIONES BÁSICAS DE LA TECNOLOGÍA ANALÍTICA DE PROCESOS (PAT)

Definición y aspectos básicos. Introducción a la calidad por el diseño (QbD). Terminología. Sinergia entre ambos conceptos. Antecedentes y situación actual. Esquemas generales de aplicación.

- Tema 2. DISEÑO DE EXPERIMENTOS

Metodología del diseño de experimentos: terminología. Modelos de trabajo: efectos y funciones de respuesta polinómicas. Optimización multivariable de procesos: cribado y superficies de respuesta. Robustez de procesos. Aplicaciones en la industria.

- Tema 3. TRATAMIENTO DE DATOS PARA EL CONTROL ANALÍTICO DE PROCESOS

Analizadores y monitorización de procesos: técnicas analíticas para PAT. Orden de instrumentos de control: datos tensoriales. Tratamiento de datos multivariados en PAT: modelos cualitativos y cuantitativos. Control multivariable de procesos. Redes neuronales artificiales en PAT.



Aplicaciones en la industria.

PRÁCTICO

- Práctica 1. USO DE PROGRAMAS ESTADÍSTICOS EN DISEÑO DE EXPERIMENTOS

Resolución de casos prácticos de optimización multivariable de procesos industriales.

- Práctica 2. USO DE PROGRAMAS ESTADÍSTICOS EN ANÁLISIS DE DATOS MULTIVARIABLE

Resolución de casos prácticos de tratamiento de obtención de información útil a partir de datos tensoriales.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL

- Bakeev, K.A. Process Analytical Technology (2nd ed). John Wiley & Sons. 2010.
- Peña, D. Regresión y Diseño de Experimentos. Alianza Editorial, 2010.
- Rosas Portugal, J.G. La Tecnología Analítica de Procesos (PAT) en la Industria Farmacéutica. Publicia, 2013.

DOCUMENTOS NORMATIVOS:

- ASTM D3764-13. Standard Practice for Validation of the Performance of Process Stream Analyzer Systems.
- ASTM D6122-13. Standard Practice for Validation of the Performance of Multivariate Online, At-Line, and Laboratory Infrared Spectrophotometer Based Analyzer Systems. American Society for Testing and Materials, 2013.
- ASTM E1325-02. Standard Terminology Relating to Design of Experiments. American Society for Testing and Materials, 2008.
- ASTM E1655-21. Standard Practices for Infrared Multivariate Quantitative Analysis. American Society for Testing and Materials, 2012.
- ASTM E2056-10. Practice for Qualifying Spectrometers and Spectrophotometers for Use in Multivariate Analyses, Calibrated Using Surrogate Mixtures. American Society for Testing and Materials, 2010.
- ASTM E2363-06A. Standard Terminology Relating to Process Analytical Technology in the Pharmaceutical Industry. American Society for Testing and Materials, 2006.
- ASTM E2629-20. Standard Guide for Verification of Process Analytical Technology (PAT) Enabled Control Systems. American Society for Testing and Materials, 2011.
- ASTM E2898-20a. Standard Guide for Risk-Based Validation of Analytical Methods for PAT Applications. American Society for Testing and Materials, 2013.
- FDA. Guidance for Industry PAT — A Framework for Innovative Pharmaceutical Development, Manufacturing, and Quality Assurance. Food and Drug Administration, 2004.
- ICH Q8(R2). Pharmaceutical Development. International Conference on Harmonisation, 2009.
- ISO 3534-3:2013. Statistics: Vocabulary and Symbols – Part 3: Design of Experiments. International Organization for Standardization, 2013.
- ISO 7870-7:2020. Control charts — Part 7: Multivariate control charts. . International



Organization for Standardization, 2020.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- Antoni, J. Design of Experiments for Engineers and Scientists. Elsevier, 2003.
- Cavazzuti, M. Optimization Methods: From Theory to Design Scientific and Technological Aspects in Mechanics. Springer, 2012.
- Cinar, A.; Palazoglu, A. Chemical Process Performance Evaluation. CRC Press, 2007.
- Koch, K. H. Process Analytical Chemistry. Springer, 1999.
- Koch, K. H. Micro Instrumentation for High Throughput Experimentation and Process Intensification – A Tool for PAT. John Wiley & Sons. 2007.
- Lazic, Z.R. Design of Experiments in Chemical Engineering. WILEY-VCH Verlag, 2004.
- Naes, T.; Isaksson, T.; Fearn, T.; Davies, T. A User-Friendly Guide to Multivariate Calibration and Classification. NIR Publications, 2004.
- Schmitt, S. Quality by Design: Putting Theory into Practice. PDA / DHI, 2011.
- Undey, C.; Low, D.; Menezes, J.C.; Koch, M. PAT Applied in Biopharmaceutical Process Development and Manufacturing: An Enabling Tool for Quality-by-Design. CRC Press, 2012.

ENLACES RECOMENDADOS

--

METODOLOGÍA DOCENTE

- MD01 Clases magistrales/expositivas. El equipo docente podrá utilizar para su desarrollo algunos de los siguientes métodos: sesión expositiva, aprendizaje basado en problemas, ejemplificación y estudio de casos.
- MD02 Clases de resolución de problemas. El equipo docente podrá utilizar algunos de los siguientes métodos para su desarrollo: Aprendizaje basado en problemas; ejemplificación y estudio de casos.
- MD04 Talleres, seminarios, debates, exposición (y/o defensa) de trabajos individuales o en grupo. El equipo docente podrá utilizar para su desarrollo algunos de los siguientes métodos: aprendizaje basado en problemas, ejemplificación y estudio de casos
- MD05 Tutorías: Programadas y de seguimiento (para trabajos de fin de Máster y Prácticas de Empresa), pudiéndose utilizar en las modalidades personalizada o en grupo, sincrónica (presenciales) o asincrónica (virtuales). La modalidad seleccionada por el equipo docente quedará recogida en la Guía Docente de cada materia
- MD07 Estudio y trabajo autónomo, individual y/o en grupo

EVALUACIÓN (instrumentos de evaluación, criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final)

EVALUACIÓN ORDINARIA

La Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que la convocatoria ordinaria estará basada preferentemente en la evaluación continua del estudiante, excepto para quienes se les haya reconocido el derecho a la evaluación única final.



La evaluación tratará de valorar los resultados del aprendizaje, y será diseñada de modo que incida en el rendimiento total del estudiante y no sólo el resultado de un examen. Tendrá un objetivo formativo y, por tanto, no se centrará en el conocimiento del estudiante como referencia dominante, sino que incluirá una valoración centrada en las capacidades, habilidades y destrezas relacionados con el trabajo y con los objetivos y resultados del aprendizaje definidos.

Se podrán aplicar los siguientes Instrumentos de evaluación:

- Pruebas escritas:

Exámenes o pruebas breves a realizar a lo largo del curso basadas en la resolución de ejercicios, casos o problemas propuestos con anterioridad por el profesor. El formato (preguntas largas, cortas, pruebas respuesta múltiple, etc.) será seleccionado por el equipo docente encargado de impartir la materia. Su contenido y duración serán establecidos de acuerdo con la Normativa de Evaluación y Calificación de Estudiante de la UGR.

- Evaluación de asistencia y participación activa:

Se basa en la valoración de actitudes e iniciativas de participación activa e interactiva en el desarrollo de la clase, en las tutorías, o en el grado de compromiso en el desarrollo de los trabajos planeados, en las prácticas de laboratorio, prácticas externas o cualquier otra tarea asignada, pudiéndose evaluar, si procede, la capacidad de trabajo en equipo. Se podrá optar por la utilización de listas de cotejo, rúbricas o instrumentos desarrollados por el equipo docente encargado de impartir la materia.

- Clases Prácticas:

Se evaluará el grado de desempeño en la realización del trabajo experimental, manejo de instrumentación y software, análisis e interpretación de datos experimentales y elaboración de registros e informes de resultados. Se podrá optar por la utilización de listas de cotejo, rúbricas o instrumentos desarrollados por el equipo docente encargado de impartir la materia.

- Resolución de ejercicios o proyectos:

Proyecto o ejercicio complejo que, el alumno o grupo de alumnos, deberá ir resolviendo por etapas a lo largo del curso. Cada etapa o hito alcanzado será evaluado y el alumno recibirá retroalimentación sobre su éxito o fracaso.

EVALUACIÓN CONTINUA

Independientemente de otros aspectos, el derecho a la evaluación continua requiere la asistencia mínima del 85% de las sesiones presenciales.

La evaluación continua supone una estrategia de evaluación global basada en cinco pilares:

1. Aptitud, asistencia y disposición en las sesiones presenciales
2. Progreso en el conocimiento adquirido y constatación de su dominio
3. Inquietud y madurez en el trabajo autónomo demostrado en la calidad técnica y científica de los informes escritos presentados
4. Implicación e interés manifestados en las consultas (tutorías)
5. Responsabilidad y compromiso en el trabajo en grupo



Por ello, se evaluará de forma continua: (i) la actitud durante el desarrollo de la materia (control de asistencia y participación); (ii) las habilidades y destrezas adquiridas (presentación de casos prácticos para trabajo en grupo); y (iii) los conocimientos alcanzados (entrevista evaluación). En cada caso se diseñarán los instrumentos de evaluación más adecuados.

Para la materialización del resultado final de la evaluación se utilizarán los siguientes criterios de calificación:

Items	% Calificación final
- Resolución de cuestiones y ejercicios prácticos en las sesiones presenciales	10
- Presentaciones orales presenciales/no presenciales	30
- Calidad de informes escritos y entrevista de evaluación	60

EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

La Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que los estudiantes que no hayan superado la asignatura en la convocatoria ordinaria dispondrán de una convocatoria extraordinaria. A ella podrán concurrir todos los estudiantes, con independencia de haber seguido o no un proceso de evaluación continua. De esta forma, el estudiante que no haya realizado la evaluación continua tendrá la posibilidad de obtener el 100% de la calificación mediante la realización de una prueba y/o trabajo.

La evaluación en convocatorias extraordinarias seguirá la misma metodología, y se aplicaran los mismos criterios descritos posteriormente para la evaluación final única.

EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

La Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que podrán acogerse a la evaluación única final, el estudiante que no pueda cumplir con el método de evaluación continua por causas justificadas. Para acogerse a la evaluación única final, el estudiante, en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura o en las dos semanas siguientes a su matriculación si ésta se ha producido con posterioridad al inicio de las clases o por causa sobrevenidas. Lo solicitará, a través del procedimiento electrónico, a la Coordinación del Máster, quien dará traslado al profesorado correspondiente, alegando y acreditando las razones que le asisten para no poder seguir el sistema de evaluación continua.

La evaluación única final implica que los estudiantes deberán demostrar el grado de adquisición de las competencias propias de la asignatura, incluyendo tanto el nivel de los conocimientos como las destrezas instrumentales adquiridas.

Los estudiantes que se acojan a esta modalidad deberán presentar previamente, y de manera periódica, una serie de informes comentados sobre los contenidos desarrollados en cada uno de los temas.

La evaluación se realizará en dos sesiones:

1. Prueba de conocimientos teóricos. La prueba constará de dos partes: (A) informe sobre la conformidad de un procedimiento operativo publicado, o de un artículo científica que describa una experiencia de implantación o validación de una metodología analítica, y (B) resolución de un caso práctico de optimización de procesos basado en la aplicación de



- diseño de experimentos.
2. Realización de una entrevista para la evaluación de los conocimientos prácticos. Serán condición indispensable para la entrevista el haber sido evaluado positivamente en el primer examen (calif $\geq 5,0$).

INFORMACIÓN ADICIONAL

- Escuela Internacional de Posgrado (Universidad de Granada): <http://escuelaposgrado.ugr.es/>
- Página Oficial de Máster: <http://masteres.ugr.es/>

Información de interés para estudiantado con discapacidad y/o Necesidades Específicas de Apoyo Educativo (NEAE): [Gestión de servicios y apoyos](https://ve.ugr.es/servicios/atencion-social/estudiantes-con-discapacidad) (<https://ve.ugr.es/servicios/atencion-social/estudiantes-con-discapacidad>).

