



## DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS Y COMPUTACIÓN

**Director:** LUIS ANTONIO SARABIA PEINADOR

Centro: ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR; FACULTAD DE CIENCIAS

Dirección: Plaza Misael Bañuelos s/n

Teléfono: 947258857

Fax: 947258831

E-mail: [matcomp@ubu.es](mailto:matcomp@ubu.es)

### Áreas de conocimiento

---

ANÁLISIS MATEMÁTICO

ESTADÍSTICA E INVESTIGACIÓN OPERATIVA

MATEMÁTICA APLICADA

### Titulaciones y Centros

---

Licenciatura en Química (2000) - Facultad de Ciencias

Licenciatura en Ciencia y Tecnología de los Alimentos - Facultad de Ciencias.

Arquitectura Técnica (1999) - Escuela Politécnica Superior.

Ingeniería Técnica Agrícola -Industrias Agrarias y Alimentarias – Escuela Politécnica Superior.

Ingeniería Técnica Industrial: Electrónica Industrial (1999) - Escuela Politécnica Superior.

Ingeniería Técnica Industrial: Mecánica (1999) - Escuela Politécnica Superior.

Ingeniería Técnica en Informática de Gestión - Escuela Politécnica Superior.

Ingeniería Técnica en Obras Públicas -Transportes y Servicios Urbanos - Escuela Politécnica Superior.

Ingeniería Técnica en Obras Públicas -Construcciones Civiles (1998) – Escuela Politécnica Superior.

Ingeniería de Caminos, Canales y Puertos - Escuela Politécnica Superior.

Ingeniería de Organización Industrial - Escuela Politécnica Superior.

Licenciatura en Ciencias del Trabajo- Facultad de Derecho.



**ÁREA DE ANÁLISIS MATEMÁTICO**

**Director:** TOMÁS PÉREZ PÉREZ

Centro: ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR; FACULTAD DE CIENCIAS

Dirección: Plaza Misael Bañuelos s/n

Teléfono: 947258829

Fax: 947258831

E-mail: [tperez@ubu.es](mailto:tperez@ubu.es)

---

**Personal Investigador**

*Profesores Titulares de Escuela Universitaria:*

TOMÁS PÉREZ PÉREZ

[tperez@ubu.es](mailto:tperez@ubu.es)

---

**Líneas de Investigación activas**

**Singularidades de aplicaciones.**

Investigador: Tomás Pérez Pérez

Código UNESCO: 1201, 1204, 1210

Palabras clave: Singularidades, Álgebras de Lie, representación de álgebras, rangos de determinación, deformaciones.

Keywords: Singularities, Lie álgebras, Lie álgebra representations, deformations.

**Quimiometría. Cómputo natural. Cualimetría.**

Investigadores: Tomás Pérez Pérez

En los tres campos científicos el grupo ha desarrollado avances metodológicos y una amplia variedad de aplicaciones en el ámbito industrial (alimentario, enológico, farmacéutico y petroquímico)

Código UNESCO: 2301, 1203.04, 1209

Palabras clave: Regresión multivariante multivía, regresión robusta, métodos avanzados de regresión con capacidad predictiva, redes neuronales, algoritmos genéticos, optimización multirrespuesta, análisis estadístico de datos, reconocimiento de pautas, diseño de experimentos, control de procesos y productos.

Keywords: Multivariate multiway regression, robust regression, outlier detection, advanced regression methods with high predictive capacity, neural network, genetic algorithms, multiresponse optimization, statistical data analysis, pattern recognition, experimental design, process and product control.

Grupo de Investigación: QA-4 Quimiometría y Cualimetría

Responsable del Grupo de Investigación: María Cruz Ortiz Fernández



## **Desarrollo de metodología para el análisis de residuos tóxicos veterinarios y contaminantes en ámbitos regulados legalmente**

Investigadores: Tomas Pérez Pérez

Desarrollo de nuevos procedimientos: a) Para la evaluación de las figuras de mérito de métodos de análisis en el contexto de las normas ISO 5725 (precisión y exactitud), ISO 11843 (capacidad de detección). b) Basados en métodos multivariantes multivía para el análisis de cribado, identificación y cuantificación de residuos tóxicos veterinarios en alimentos destinados a consumo humano conforme a normativas legales (Decisión 2002/657/CE) y pesticidas (SANCO 10232/2006).

Código UNESCO: 2301, 1203.04, 1209

Palabras clave: Calibración multivariante-multivía, validación de métodos, estandarización, análisis de flujo, cromatografía de líquidos, cromatografía de gases, detección coulombimétrica, de serie de diodos, espectrometría de masas, espectroscopia de fluorescencia molecular, fluorescencia frontal, extracción en fase sólida, microextracción, análisis medioambiental, farmacéutico, análisis de residuos veterinarios, pesticidas.

Keywords: Multivariate multiway calibration, validation methods, standardization, flow analysis, liquid and gas chromatography, coulombimetric detection, diode array detector, mass spectrometry, molecular fluorescence spectroscopy, front face fluorescence, solid phase extraction, microextraction, environmental and pharmaceutical analyses, analyses of veterinary and pesticide residues.

Grupo de Investigación: QA-4 Quimiometría y Cualimetría

Responsable del Grupo de Investigación: María Cruz Ortiz Fernández

### **Infraestructura científica y grandes equipos**

---

Workstation SUN Enterprise 450.

### **Actividades Investigadoras**

---

### **PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN COMPETITIVOS**

---

#### **Desarrollo de métodos analíticos utilizando extracción en línea y/o microextracción en fase sólida con calibrados de n-vías basados en PARAFAC y técnicas afines. Aplicación al análisis de residuos y contaminantes en el marco de la legislación europea**

Entidad financiadora: Junta de Castilla y León. Consejería de Educación y Cultura. Dirección General de Universidades e Investigación. (BU 024A07)

Entidades participantes: Universidad de Burgos

05/07/2007-31/10/2010



## MEMORIA DE INVESTIGACIÓN 2007. UNIVERSIDAD DE BURGOS

Departamento de Matemáticas y Computación

---

Cuantía: 16.200 euros

Investigador responsable: María Cruz Ortiz Fernández

Número de investigadores participantes: 9

Investigadores del área: Tomás Pérez Pérez

### **Figuras de mérito de métodos de análisis químico con calibrado de tres vías. Aplicación al análisis de residuos según la Directiva 2002/657/CE.**

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia. Dirección General de Investigación. Subdirección General de Proyectos de Investigación. (CTQ2004-07216/BQU)

Entidades participantes: Universidad de Burgos

13/12/2004-12/12/2007

Cuantía: 71.300 euros

Investigador responsable: María Cruz Ortiz Fernández

Número de investigadores participantes: 6

Investigadores del área: Tomás Pérez Pérez

## **Ponencias y Comunicaciones a Congresos**

---

### **CONGRESOS NACIONALES**

---

Sagrario Beltrán Calvo, Ana Herrero Gutiérrez, Ana Marta Navarro Cuñado, María de los Remedios Pedrosa Sáez, Tomás Pérez Pérez, María Sagrario Sánchez Pastor, Luis Antonio Sarabia Peinador, Teresa Sanz Diez, Celia Reguera Alonso, Indalecio Antonio Peñacoba Maestre, Susana Palmero Díaz, Francisco Javier Hoyuelos Álvaro, Javier García Tojal, Francisco Javier Arnáiz García, Isabel Verónica Tricio Gómez, Roberto José Sanz Diez, Saturnino Ibeas Cortes, María Cruz Ortiz Fernández, Silvia Sanllorente Méndez, María del Carmen Pereira Fuentes

### **Evaluación de modalidades y métodos en prácticas multidisciplinares en el currículo de Química en el contexto del E. E. E. S.**

Tipo de participación: COMUNICACIÓN ORAL

II Reunión INDOQUIM (Innovación Docente en Química)

Vigo

20/06/2007 - 22/06/2007



**ÁREA DE ESTADÍSTICA E INV. OPERATIVA**

**Director:** LUIS ANTONIO SARABIA PEINADOR

Centro: ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR; FACULTAD DE CIENCIAS

Dirección: Plaza Misael Bañuelos s/n

Teléfono: 947258829

Fax: 947258831

E-mail: [lsarabia@ubu.es](mailto:lsarabia@ubu.es)

**Personal Investigador**

---

*Catedráticos de Universidad:*

LUIS ANTONIO SARABIA  
PEINADOR

[lsarabia@ubu.es](mailto:lsarabia@ubu.es)

*Profesores Titulares de Universidad:*

MARÍA SAGRARIO SÁNCHEZ  
PASTOR

[ssanchez@ubu.es](mailto:ssanchez@ubu.es)

**Líneas de Investigación activas**

---

**Quimiometría. Cómputo natural. Cualimetría.**

Investigadores: Luis Antonio Sarabia Peinador, María Sagrario Sánchez Pastor

En los tres campos científicos el grupo ha desarrollado avances metodológicos y una amplia variedad de aplicaciones en el ámbito industrial (alimentario, enológico, farmacéutico y petroquímico)

Código UNESCO: 2301, 1203.04, 1209

Palabras clave: Regresión multivariante multivía, regresión robusta, métodos avanzados de regresión con capacidad predictiva, redes neuronales, algoritmos genéticos, optimización multirrespuesta, análisis estadístico de datos, reconocimiento de pautas, diseño de experimentos, control de procesos y productos.

Keywords: Multivariate multiway regression, robust regression, outlier detection, advanced regression methods with high predictive capacity, neural network, genetic algorithms, multiresponse optimization, statistical data analysis, pattern recognition, experimental design, process and product control.

Grupo de Investigación: QA-4 Quimiometría y Cualimetría

Responsable del Grupo de Investigación: María Cruz Ortiz Fernández



**Desarrollo de metodología para el análisis de residuos tóxicos veterinarios y contaminantes en ámbitos regulados legalmente**

Investigadores: Luis Antonio Sarabia Peinador, María Sagrario Sánchez Pastor

Desarrollo de nuevos procedimientos: a) Para la evaluación de las figuras de mérito de métodos de análisis en el contexto de las normas ISO 5725 (precisión y exactitud), ISO 11843 (capacidad de detección). b) Basados en métodos multivariantes multivía para el análisis de cribado, identificación y cuantificación de residuos tóxicos veterinarios en alimentos destinados a consumo humano conforme a normativas legales (Decisión 2002/657/CE) y pesticidas (SANCO 10232/2006).

Código UNESCO: 2301, 1203.04, 1209

Palabras clave: Calibración multivariante-multivía, validación de métodos, estandarización, análisis de flujo, cromatografía de líquidos, cromatografía de gases, detección coulombimétrica, de serie de diodos, espectrometría de masas, espectroscopia de fluorescencia molecular, fluorescencia frontal, extracción en fase sólida, microextracción, análisis medioambiental, farmacéutico, análisis de residuos veterinarios, pesticidas.

Keywords: Multivariate multiway calibration, validation methods, standardization, flow analysis, liquid and gas chromatography, coulombimetric detection, diode array detector, mass spectrometry, molecular fluorescence spectroscopy, front face fluorescence, solid phase extraction, microextraction, environmental and pharmaceutical analyses, analyses of veterinary and pesticide residues.

Grupo de Investigación: QA-4 Quimiometría y Cualimetría

Responsable del Grupo de Investigación: María Cruz Ortiz Fernández



## **Actividades Investigadoras**

---

### **PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN COMPETITIVOS**

---

**Desarrollo de métodos analíticos utilizando extracción en línea y/o microextracción en fase sólida con calibrados de n-vías basados en PARAFAC y técnicas afines. Aplicación al análisis de residuos y contaminantes en el marco de la legislación europea**

Entidad financiadora: Junta de Castilla y León. Consejería de Educación y Cultura. Dirección General de Universidades e Investigación. (BU 024A07)

Entidades participantes: Universidad de Burgos

05/07/2007-31/10/2010

Cuantía: 16.200 euros

Investigador responsable: María Cruz Ortiz Fernández

Número de investigadores participantes: 9

Investigadores del área: Luis Antonio Sarabia Peinador, María Sagrario Sánchez Pastor

**Figuras de mérito de métodos de análisis químico con calibrado de tres vías. Aplicación al análisis de residuos según la Directiva 2002/657/CE.**

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia. Dirección General de Investigación. Subdirección General de Proyectos de Investigación. (CTQ2004-07216/BQU)

Entidades participantes: Universidad de Burgos

13/12/2004-12/12/2007

Cuantía: 71.300 euros

Investigador responsable: María Cruz Ortiz Fernández

Número de investigadores participantes: 6

Investigadores del área: Luis Antonio Sarabia Peinador, María Sagrario Sánchez Pastor

**Red temática de Quimiometría (Modalidad B).**

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia. Dirección General de Investigación. Subdirección General de Proyectos de Investigación. (CTQ2007-28940-E/BQU)

Entidades participantes: Universidades de Barcelona, Autónoma de Barcelona, Rovira i Virgili, Lleida, Girona, Santiago de Compostela, A Coruña, Granada, Córdoba, Valencia, La Rioja, Burgos y C. S. I C.

01/09/2007 - 01/09/2008

Cuantía: 10.000 euros.

Investigador responsable: Ana María de Juan Capdevila

Investigador en la Universidad de Burgos: María Cruz Ortiz Fernández

Número de investigadores participantes: 28

Investigadores del área: Luis Antonio Sarabia Peinador, María Sagrario Sánchez Pastor



## **CONTRATOS DE I+D+I**

---

### **Asesoría en la evaluación de modelos para la predicción de estabilidad de advair. Revisión de informes (technical memorandum)**

ART. 83 CONTRATO DE I+D+I

Empresa financiadora: Glaxo Smith-Kline S.A.

15/10/2007 - 31/12/2008

Investigadores responsables: María Cruz Ortiz. Luis Sarabia

Presupuesto: 3.000 €

## **MEMORIAS DE LICENCIATURA Y PROYECTOS FIN DE CARRERA**

---

### **Puesta a punto y optimización de un procedimiento para determinar verde de malaquita y leucomalaquita en pescado mediante LC-MS-MS.**

Autor: David Arroyo Arenal

Facultad de Ciencias

24/07/2007

Directores: María Cruz Ortiz Fernández, Luis Antonio Sarabia Peinador

Practicum

### **Optimización multirespuesta de un procedimiento de derivatización en la determinación de estrona y 17- $\alpha$ etinilestradiol por CG-MS. Aplicación a orina de bovino.**

Autor: David Arroyo Arenal

Facultad de Ciencias

24/07/2007

Directores: María Cruz Ortiz Fernández, Luis Antonio Sarabia Peinador

Complemento al Practicum

### **Optimización de un color determinado en la mezcla de colorantes alimentarios usando la metodología de diseño de experimentos de mezclas y funciones de deseabilidad.**

Autor: Javier González

Facultad de Ciencias

24/07/2007

Directores: María Cruz Ortiz Fernández, Luis Antonio Sarabia Peinador

Complemento al Practicum

### **Optimización de los parámetros de un proceso de espumación del poliuretano.**

Autor: Javier González

Facultad de Ciencias

24/07/2007

Directores: María Cruz Ortiz Fernández, Luis Antonio Sarabia Peinador

Practicum



**Prácticas en el grupo AMCOR flexibles.**

Autor: Marta Carranza Llorente

Facultad de Ciencias

24/07/2007

Directores: Ana Herrero, María Sagrario Sánchez

Practicum

**Seguimiento de la calidad del aceite de oliva.**

Autor: Marta Carranza Llorente

Facultad de Ciencias

24/07/2007

Directores: Ana Herrero, María Sagrario Sánchez

Complemento al Practicum

**Validación de procedimientos analíticos para el análisis de leche.  
Algunas alternativas robustas, para la determinación de la  
reproducibilidad, en el marco de la ISO 5725-5.**

Autor: David Delgado Fuente

Facultad de Ciencias

24/07/2007

Directores: María Cruz Ortiz Fernández, Luis Antonio Sarabia Peinador

Complemento al Practicum

**Optimización de un procedimiento de extracción de tetraciclinas en  
miel mediante un diseño factorial y cuantificación por HPLC-DAD.**

Autor: José Manuel Aldama

Facultad de Ciencias

20/09/2007

Directores: María Cruz Ortiz Fernández, Luis Antonio Sarabia Peinador

Complemento al Practicum

**Control y mantenimiento de un procedimiento para determinar  
Amonio en aguas de consumo por espectrofotometría de absorción  
molecular visible.**

Autor: José Manuel Aldama

Facultad de Ciencias

20/09/2007

Directores: María Cruz Ortiz Fernández, Luis Antonio Sarabia Peinador

Practicum

**Análisis multivariante de la relación de parámetros del proceso de  
formación de tablero con su calidad.**

Autor: José Tomás Alonso Arribas

Facultad de Ciencias

20/09/2007

Directores: María Cruz Ortiz Fernández, Luis Antonio Sarabia Peinador

Complemento al Practicum



## Publicaciones

---

### ARTÍCULOS EN REVISTAS INTERNACIONALES

---

R. Díez, Luis Antonio Sarabia Peinador, María Cruz Ortiz Fernández  
**Rapid determination of sulfonamides in milk samples using fluorescence spectroscopy and class modeling with n-way partial least squares.**

Analytica Chimica Acta, 585, 2007, 350 - 360

ISSN: 00032670

María Cruz Ortiz Fernández, J. M. Aldama, I. García, Luis Antonio Sarabia Peinador

**Validation of an analytical method to determine sulfamides in kidney by HPLC-DAD and PARAFAC2 with first-order derivative chromatograms.**

Analytica Chimica Acta, 587, 2007, 222 - 234

ISSN: 00032670

Noelia Rodríguez Contreras, Ana Herrero Gutiérrez, Luis Antonio Sarabia Peinador, María Cruz Ortiz Fernández

**Performance characteristics according to Commission Decision 2002/657/EC in the fluorimetric determination of tetracycline in the absence and in the presence of magnesium**

Luminescence, 2007, 22, 518 - 526

ISSN: 0950-0529

Blanca Delia Real García, María Cruz Ortiz Fernández, Luis Antonio Sarabia Peinador

**Analysis of interferents by means a D-optimal screening design and calibration using partial least squares regression in the spectrophotometric determination of Cr(VI)**

Talanta, 71, 2007, 1599 - 1609

ISSN: 0039-9140

J. A. Pérez-Serradilla, María Cruz Ortiz Fernández, Luis Antonio Sarabia Peinador, M. D. Luque de Castro,

**Focused microwave-assisted Soxhlet extraction of acorn oil for the determination of fatty acid profile by CG-MS. Comparison with conventional and standard methods**

Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2007, 388, 451 - 462

ISSN: 1618-2642



David Arroyo Arenal, Maria Cruz Ortiz Fernández, Luis Antonio Sarabia Peinador

**Multiresponse optimization and parallel factor analysis, useful tools in the determination of estrogens by gas chromatography-mass spectrometry**

Journal of Chromatography A, 2007, 1157, 358 - 368

ISSN: 0021-9673

Rocío Díez Azofra, Luis Antonio Sarabia, María Cruz Ortiz Fernández Peinador

**Optimization of analytical conditions and validation of a fluorescence method for the determination of sulfadiazine in milk**

Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2007, 388, 957 - 968

ISSN: 1618-2642

Maria Cruz Ortiz Fernández, Luis Antonio Sarabia Peinador

**Quantitative determination in chromatographic analysis based on n-way calibration strategies**

Journal of Chromatography A, 2007, 1158, 94 - 110

ISSN: 0021-9673

---

**COLABORACIÓN EN OBRAS COLECTIVAS**

---

Maria Cruz Ortiz Fernández, Luis Antonio Sarabia Peinador

**Análisis de agrupaciones (cluster)**

Título de la obra colectiva: **Temas Avanzados de Quimiometría**

Paginas 389 a 420

ISBN: 987-84-8384-006-1

Universidad de las Islas Baleares, 2007

Luis Antonio Sarabia Peinador, María Cruz Ortiz Fernández, María Sagrario Sánchez Pastor, Ana Herrero Gutiérrez,

**Análisis de resultados individuales correlacionando la evolución de las cohortes de alumnos**

Título de la obra colectiva: **Estudio de evaluación de las matemáticas en Castilla y León**

Paginas 33 a 59

ISBN: 978-84-690-9252-1

Junta de Castilla y León, Consejería de Educación .DGC, IPE, 2007

Luis Antonio Sarabia Peinador, Francisca Calleja González

**Sección Resultados**

Título de la obra colectiva: **Estudio de evaluación de las matemáticas en el sistema educativo de Castilla y León.**

Paginas 85 a 139

VA-251-2007

Junta de Castilla y León. Consejería de Educación., Valladolid, 2007



Luis Antonio Sarabia Peinador, Antonio Arroyo Miguel

**Sección Conclusiones**

Título de la obra colectiva: **Estudio de evaluación de las matemáticas en el sistema educativo de Castilla y León**

Páginas 141 a 184

VA-251-2007

Junta de Castilla y León. Consejería de Educación., Valladolid, 2007

I. I. Cuesta, J. M. Alegre, L. Sarabia, M. S. Sánchez

**Determinación de los parámetros del modelo de Gurson-Tvergaard para la simulación del ensayo de small punch en Anales de Mecánica de la Fractura 24, Vol. II**

Páginas 429 a 434

ISSN: 0213-3725

2007

---

**Ponencias y Comunicaciones a Congresos**

---

**CONGRESOS INTERNACIONALES**

---

Rocío Díez Azofra, María Cruz Ortiz Fernández, Luis Antonio Sarabia Peinador, Inés Birlouez-Aragón

**Front face fluorescence spectroscopy together with Partial Least Squares calibration: a suitable tool for the assessment of the impact of the thermal treatment of a whey-based model for infant milk formulas**

Tipo de participación: POSTERS

PLS 07 5<sup>th</sup> International Symposium on PLS and related methods

Oslo, Noruega

05/09/2007 - 07/09/2007

María Cruz Ortiz Fernández, Luis Antonio Sarabia Peinador

**N-way data and experimental design, useful tools in Analytical Chemistry**

Tipo de participación: CONFERENCIA INVITADA

Saint Maximin- Provence, Francia

05/09/2007 - 07/09/2007

Nombre del libro de actas: VI Colloquium Chemiometricum Mediterraneum

Blanca-Delia Real García, Noelia Rodríguez Contreras, María Cruz Ortiz, Luis Antonio Sarabia Peinador Fernández, Ana Herrero Gutiérrez

**An experimental strategy in conjunction with PARAFAC modeling to handle the matrix effects in the determination of tetracycline in milk**

Tipo de participación: POSTERS

VI Colloquium Chemiometricum Mediterraneum

Saint Maximin- Provence, Francia

05/09/2007 - 07/09/2007



Daniel Sarabia, César de Prada, María Cruz Ortiz Fernández, Luis Antonio Sarabia Peinador

**Integrated design of a supermarket refrigeration system by means experimental design**

Tipo de participación: COMUNICACIÓN ORAL

Saint Maximin- Provence, Francia

05/09/2007 - 07/09/2007

VI Colloquium Chemiometricum Mediterraneum

E. Meléndez, M.S. Sánchez, M.C. Ortiz, L. A. Sarabia, M. Íñiguez.

**Comparing the performance characteristics of calibration models made by partial least squares and neural networks with MIR spectra of red wines from the D.O. Rioja**

Tipo de participación: PÓSTER

Saint Maximin- Provence, Francia.

05/09/2007-07/09/2007

VI Colloquium Chemiometricum Mediterraneum

Noelia Rodríguez, María Cruz Ortiz, Luis. A. Sarabia, Ana Herrero.

**Four-way PARAFAC decomposition in the quantification of analytes by fuorescence in the presence of quenching effect**

Tipo de participación: PÓSTER

Saint Maximin- Provence, Francia.

05/09/2007-07/09/2007

VI Colloquium Chemiometricum Mediterraneum

David Arroyo, M. Cruz Ortiz, Luis A. Sarabia and Francisco Palacios

**Multiresponse optimization of a procedure to determination of malachite green and leucomalaquite green in fish by LC-MS-MS**

Tipo de participación: PÓSTER

Saint Maximin- Provence, Francia.

05/09/2007-07/09/2007

VI Colloquium Chemiometricum Mediterraneum

David Arroyo, M. Cruz Ortiz, Luis A. Sarabia and Francisco Palacios

**Maintenance of N-way calibration models in the determination of malachite green and its metabolite in fish by LC-MS-MS.**

Tipo de participación: COMUNICACIÓN ORAL

VII Meeting of the Spanish Society of Chromatography and Related Techniches

Granada, España

17/10/2007 -19/10/2007

Blanca Delia Real, María Cruz Ortiz, Luis A. Sarabia

**Viability of identification criteria stated in SANCO 10232/2006 in the determination of triazines by means of GC-MS with PARAFAC calibration model.**

Tipo de participación: POSTER

VII Meeting of the Spanish Society of Chromatography and Related Techniches



Granada, España

17/10/2007 -19/10/2007

Noelia Rodríguez, R. Díez, M. Cruz Ortiz, Luis A. Sarabia

**A New fast method based on front face fluorescence for the screening of sulfonamides in infant milk samples.**

Tipo de participación: PÓSTER

IX International Symposium on Analytical Methodology in the Environmental Field.

Pollensa, Mallorca, España

03/10/2007 -05/10/2007

---

**CONGRESOS NACIONALES**

---

I. I. Cuesta, J. M. Alegre, L. Sarabia, M. S. Sánchez

**Determinación de los parámetros del modelo de Gurson-Tvergaard para la simulación del ensayo de *small punch***

XXIV Congreso Anual del Grupo Español de Fractura

Burgos, España

21/03/2007-23/03/2007

L. A. Sarabia, M. C. Ortiz, S. Sánchez, A. Herrero.

**Análisis de resultados individuales correlacionando la evolución de las cohortes de alumnos**

Tipo de participación: COMUNICACIÓN ORAL

Encuentro de profesores de matemáticas organizado por Fundación

Universidades de Castilla y León

Valladolid, España.

28/02/2007

L. A. Sarabia.

**Integración de resultados del Estudio de evaluación de las matemáticas en el sistema educativo de Castilla y León. Evaluación, Mejora e Innovación.**

Tipo de participación: Ponencia

Encuentro de profesores de matemáticas organizado por Fundación

Universidades de Castilla y León

Valladolid, España.

28/02/2007

Sagrario Beltrán Calvo, Ana Herrero Gutiérrez, Ana Marta Navarro Cuñado, María de los Remedios Pedrosa Sáez, Tomas Pérez Pérez, María Sagrario Sánchez Pastor, Luis Antonio Sarabia Peinador, Teresa Sanz Díez, Celia Reguera Alonso, Indalecio Antonio Peñacoba Maestre, Susana Palmero Díaz, Francisco Javier Hoyuelos Álvaro, Javier García Tojal, Francisco Javier Arnaiz García, Isabel Verónica Tricio Gómez, Roberto José Sanz Díez, Saturnino Ibeas Cortes, María Cruz Ortiz Fernández, Silvia Sanllorente Méndez, María del Carmen Pereira Fuentes

**Evaluación de modalidades y métodos en prácticas multidisciplinares en el currículo de Química en el contexto del E. E. E. S.**



Tipo de participación: COMUNICACIÓN ORAL

II Reunión INDOQUIM (Innovación Docente en Química)

Vigo, España

20/06/2007 - 22/06/2007

Marta Navarro, Ana Herrero, Francisco Javier Hoyuelos, Saturnino Ibeas, Aranzazu Mendia., Alberto Núñez, María Cruz Ortiz, Susana Palmero, Indalecio Peñacoba, Silvia Sanllorente, Luis Sarabia, María Sagrario Sánchez

**Evaluación por competencias (autoaprendizaje y toma de decisiones) en la modalidad de trabajo en grupo.**

Tipo de participación: PÓSTER

II Reunión INDOQUIM (Innovación Docente en Química)

Vigo, España

20/06/2007 - 22/06/2007

Ana Herrero, María Cruz Ortiz, Susana Palmero, Celia Reguera, Silvia Sanllorente, Luis Sarabia, María Sagrario Sánchez .

**Evaluación de competencias y habilidades en una práctica de laboratorio que incorpora conocimientos interdisciplinares en las enseñanzas de Grado/Postgrado en Química**

Tipo de participación: PÓSTER

II Reunión INDOQUIM (Innovación Docente en Química)

Vigo, España

20/06/2007 - 22/06/2007

María Cruz Ortiz, Silvia Sanllorente, Ana Herrero, Susana Palmero, Celia Reguera, María Sagrario Sánchez, Luis Antonio Sarabia

**Análisis multivariante en las prácticas de Química Analítica**

Tipo de participación: PÓSTER

XXXI Reunión Bienal de la RSEQ

Toledo, España

09/09/2007 - 14/09/2007



**ÁREA DE MATEMÁTICA APLICADA**

**Director:** ANTONIO MARÍA TELLA LLOP

Centro: ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR; FACULTAD DE CIENCIAS

Dirección: C/ Villadiego s/n

Teléfono: 947259427

Fax: 947259478

E-mail: [atella@ubu.es](mailto:atella@ubu.es)

**Personal Investigador**

---

*Catedráticos de Escuela Universitaria:*

HONORATO DIEZ FERNÁNDEZ      [hdiez@ubu.es](mailto:hdiez@ubu.es)

*Profesores Titulares de Universidad:*

NURIA REGUERA LÓPEZ      [nreguera@ubu.es](mailto:nreguera@ubu.es)

*Profesores Titulares de Escuela Universitaria:*

NURIA SEVILLA GALLO      [nsevilla@ubu.es](mailto:nsevilla@ubu.es)

JOSÉ LUIS HERNANDO IBEAS      [dibeas@ubu.es](mailto:dibeas@ubu.es)

MARÍA JESÚS SALAS GARCÍA      [msalas@ubu.es](mailto:msalas@ubu.es)

MARÍA PILAR DE LAS HERAS      [pilarh@ubu.es](mailto:pilarh@ubu.es)

GONZÁLEZ

ISIDORA ALBILLOS ESCRIBANO      [dalbillo@ubu.es](mailto:dalbillo@ubu.es)

ANA LORENTE MARÍN      [alorente@ubu.es](mailto:alorente@ubu.es)

ISABEL RODRÍGUEZ AMIGO      [irodri@ubu.es](mailto:irodri@ubu.es)

MARÍA JOSÉ ZAPATERO MORENO      [pzapa@ubu.es](mailto:pzapa@ubu.es)

ELENA CEBRIÁN DE BARRIO      [elenac@ubu.es](mailto:elenac@ubu.es)

ANTONIO MARÍA TELLA LLOP      [atella@ubu.es](mailto:atella@ubu.es)

SANTIAGO RUIZ MIGUEL      [rumi@ubu.es](mailto:rumi@ubu.es)

MARÍA DEL CARMEN RODRÍGUEZ      [cramigo@ubu.es](mailto:cramigo@ubu.es)

AMIGO

ANA PACHECO DE BONROSTRO      [apacheco@ubu.es](mailto:apacheco@ubu.es)

MARIA BEGOÑA TORRES      [begonia@ubu.es](mailto:begonia@ubu.es)

CABRERA

TEÓFILO GARCÍA CALDERÓN      [tegarcal@ubu.es](mailto:tegarcal@ubu.es)

FELIX ROBERTO PÉREZ      [ropesa@ubu.es](mailto:ropesa@ubu.es)

SERRANO

MANUEL GARCÍA VELÁZQUEZ      [vegama@ubu.es](mailto:vegama@ubu.es)

MARÍA SOLEDAD TOBAR PUENTE      [mstobar@ubu.es](mailto:mstobar@ubu.es)

ÁNGEL ÁLVAREZ DÍAZ      [aalvarez@ubu.es](mailto:aalvarez@ubu.es)

JOSÉ LUIS FERNÁNDEZ SAINZ      [jlfernand@ubu.es](mailto:jlfernand@ubu.es)

DE AJA

*Ayudantes Doctores:*

ANTONIO MANZANO RODRÍGUEZ      [amanzano@ubu.es](mailto:amanzano@ubu.es)



*Profesores Asociados:*

JOAQUIN AGUILAR BARRIUSO (6+6)	<a href="mailto:jaguilar@ubu.es">jaguilar@ubu.es</a>
ANTONIO ARROYO MIGUEL (3+3)	<a href="mailto:aamiguel@ubu.es">aamiguel@ubu.es</a>
MARTA SALAS CARDERO (6+6)	<a href="mailto:mcardero@ubu.es">mcardero@ubu.es</a>
ALFONSO HERNANDO GONZÁLEZ (3+3)	<a href="mailto:ahernan@ubu.es">ahernan@ubu.es</a>
MARÍA ANA MATEOS UTRILLA (6+6)	<a href="mailto:mamateos@ubu.es">mamateos@ubu.es</a>
AMAYA MARTÍNEZ PURAS (Tipo 2, TC)	<a href="mailto:amayamar@ubu.es">amayamar@ubu.es</a>

---

### **Líneas de Investigación activas**

#### **Método de elementos finitos aplicados a la ingeniería: Modelos matemáticos y acotación de error.**

Investigadores: Honorato Diez Fernández

Descripción: Estudio y validación de los modelos matemáticos: ecuaciones diferenciales que los cuantifican, solución numérica y su simulación en ordenador.

Description: Derivation of the differential equations in the mathematical models and the computer simulations.

Código UNESCO: 1206

Palabras clave: Simulación numérica, método de elementos finitos (MEF).

Keywords: Numerical simulation, finite element method (FEM).

Grupo de Investigación: GMAMMI

Responsable del Grupo de Investigación: María Begoña Torres Cabrera

#### **Estudio de algunos modelos físico-matemáticos aplicados a la Ingeniería.**

Investigadores: M. Begoña Torres, Honorato Diez Fernández, Antonio Manzano Rodríguez, Elena Cebrián de Barrio, Ana Lorente Marín, Amaya Martínez Puras

Descripción: Se analizan las hipótesis para la simplificación de algunas teorías físico-matemáticas de la Ingeniería Civil reconociendo los modelos y buscando soluciones exactas y aproximadas. Los resultados serán extrapolados a otros campos científicos.

Description: We analyse the assumptions to simplify some physical and mathematical theories of the Civil Engineering searching the models and trying to find exact and rough solutions. The results will be extrapolated to others scientific fields.

Código UNESCO: 1206, 330506

Palabras clave: Métodos numéricos, ingeniería civil

Keywords: Numerical methods, civil engineering

Grupo de Investigación: GMAMMI



Responsable del Grupo: María Begoña Torres Cabrera

### **Modelos discretos para teoría de colas.**

Investigadores: Ana Lorente Marín.

Descripción: Modelos discretos para teoría de colas.

Description: Discrete-time queuing models.

Código UNESCO:

Palabras clave:

Keywords: Queuing models.

Tesis en colaboración con María Cruz Valsero (Universidad de Valladolid)

Responsable del Grupo de Investigación:

### **Estudio de nuevos materiales para aplicaciones en nanotecnología, aleaciones metálicas y nuevas configuraciones magnéticas.**

Investigadores: M. Begoña Torres Cabrera

Descripción: Esta línea, mediante el cálculo de estructuras electrónicas y moleculares, está orientada al estudio teórico de propiedades inherentes a los sistemas de dimensiones nanométricas.

Description: Calculating the electronic and molecular structures, we study from a theoretical point of view the properties of the systems with nanometric dimensions.

Código UNESCO: 2211

Palabras clave: Nuevos materiales, aleaciones, magnetismo, dinámica molecular, cómputo en paralelo

Keywords: Advanced materials, alloys, magnetism, molecular dynamics, parallel computing

Grupo de Investigación: GMAMMI

Responsable del Grupo: M. Begoña Torres Cabrera

## **Actividades Investigadoras**

---

### **PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN COMPETITIVOS**

---

#### **Propiedades Estructurales, Electrónicas y Térmicas de Nanosistemas de Interés Tecnológico en Espintrónica, Reactividad de Superficies y Nuevas Aleaciones Líquidas.**

Entidad Financiadora: Junta de Castilla y León, Va068A06

Duración: 01/07/2006 - 31/07/2009

Investigador responsable: Andrés Vega Hierro

Otros investigadores participantes: María Begoña Torres Cabrera, Luis Carlos Balbás Ruesgas

#### **Modelización Avanzada de la Demanda de Viajes Interurbanos: Prueba Piloto en una Comunidad Autónoma**

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Duración: 01/10/2007 - 30/09/2008



## MEMORIA DE INVESTIGACIÓN 2007. UNIVERSIDAD DE BURGOS

Departamento de Matemáticas y Computación

---

Cuántía de la subvención: 7.200 €

Investigador responsable: Hernán Gonzalo Orden

Otros investigadores participantes: Elena Cebrián de Barrio, Luigi dell Olio, Mario Víctor Sanjuán García, Eduardo Escudero Barbero, Alfonso Orro Arcay, Marta Rojo Arce, Maria Isabel Landaluce Calvo, Honorato Díez Fernández

### **Entropía, Interpolación y Espacios de Funciones**

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Vigo, University of Leipzig, Universidad de Burgos, University of Lund, Universidad de Murcia

Duración: 01/10/2007 - 03/08/2010

Investigador responsable: Fernando Cobos

Otros investigadores participantes: Antonio Manzano Rodríguez

### **Resolución numérica de Ecuaciones en Derivadas Parciales con propiedades cualitativas a imitar**

Duración: 05/07/2007 - 31/12/2009

Investigador responsable: Begoña Cano Urdiales

Otros investigadores participantes: Nuria Reguera López, María Jesús Moreta, Isaías Alonso Mallo

### **Aproximación numérica de orden alto e integración geométrica de ecuaciones en derivadas parciales**

Duración: 12/12/2007 - 12/12/2010

Investigador responsable: Isaías Alonso Mallo

Otros investigadores participantes: Nuria Reguera López, Begoña Cano Urdiales, María Jesús Moreta

### **Estudio Teórico de Propiedades Estructurales, Electrónicas y Térmicas de Sistemas Nanodimensionales de Interés Tecnológico**

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia, MAT2005-03415

Duración: Diciembre de 2005 a Diciembre de 2008

Investigador Principal: Dr. Andrés Vega Hierro

## **Publicaciones**

---

### **ARTÍCULOS EN REVISTAS INTERNACIONALES**

---

María Begoña Torres Cabrera, Luis Carlos Balbás Ruesgas

**Relative stability of Sin and SinSc- clusters in the range n=14-18**

European Physics Journal D, 43, 2007, 217 - 220

María Begoña Torres Cabrera, Eva M. Fernández, Luis Carlos Balbás Ruesgas

**Theoretical study of isoelectronic SinM clusters (M=Sc-, Ti, V+; n=14-18)**

Physical Review B, 75, 2007, 205425

ISSN: 1098-0121



Antonio Manzano Rodríguez, Fernando Cobos, Antón Martínez, Luz M. Fernández-Cabrera

**Logarithmic interpolation spaces between quasi-Banach spaces**

Journal for Analysis and its applications Zeitschrift für Analysis und ihre Anwendungen , 2007, 65 - 86

Antonio Manzano Rodríguez, Fernando Cobos, Antón Martínez, Luz M. Fernández-Cabrera

**Inclusion indices of quasi-Banach spaces**

Bolletino della Unione Matematica Italiana, 2007, 99 - 117

María Begoña Torres Cabrera, Eva M. Fernández, Luis Carlos Balbás Ruesgas

**Structure and relative stability of Sin, Sin-, and doped SinM clusters (M=Sc-, Ti, V+) in the range n = 14-18**

Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering, 2007, 241 - 256

ISSN: 1472-7978

---

### ARTÍCULOS EN REVISTAS NACIONALES

---

Antonio Manzano Rodríguez, Mieczyslaw Mastylo

**Generalized Lions-Peetre methods of constants and means and operator ideals**

Collectanea Mathematica

Páginas: 45 - 60

2007

---

### COLABORACIÓN EN OBRAS COLECTIVAS

---

Nuria Reguera López, Isaías Alonso Mallo

**Local Absorbing Boundary Conditions for a Finite Element Discretization of the Cubic Nonlinear Schrödinger Equation**

Título de la obra colectiva: **Proceedings of the Word Congress on Engineering 2007**

2007

Antonio Arroyo Miguel, Luis Antonio Sarabia Peinador

**Sección Resultados**

Título de la obra colectiva: **Estudio de evaluación de las matemáticas en el sistema educativo de Castilla y León.**

Junta de Castilla y León. Consejería de Educación., Valladolid, 2007

Antonio Manzano Rodriguez

**Duality for coorbit interpolation functors generated by operador ideals.**



Título de la obra colectiva: **Contemporary Mathematics, volumen 445, Pág. 225 a 235.**

2007

### **Ponencias y Comunicaciones a Congresos**

---

#### **CONGRESOS INTERNACIONALES**

---

Nuria Reguera López, Isaías Alonso Mallo

**Local absorbing boundary conditions for a finite element discretization of the cubic nonlinear Schrödinger equation**

Tipo de participación: COMUNICACIÓN ORAL

Londres, Reino Unido

02/07/2007 - 04/07/2007

#### **CONGRESOS NACIONALES**

---

Antonio Manzano Rodríguez

**Duality for coorbit interpolation functors generated by operator ideals**

Tipo de participación: POSTERS

X Encuentros de Análisis Real y Complejo

Palma de Mallorca

10/05/2007 - 13/05/2007

Nuria Reguera López, Isaías Alonso Mallo

**Condiciones de frontera absorbentes para la ecuación de Schrödinger no lineal discretizada con elementos finitos**

Tipo de participación: COMUNICACIÓN ORAL

Sevilla

24/09/2007 - 28/09/2007

### **Actividades Científicas**

---

#### **CURSOS O SEMINARIOS IMPARTIDOS DE CARÁCTER CIENTÍFICO O TÉCNICO**

---

Estimulación del Talento Matemático

Profesora: María Pilar de las Heras González

Proyecto Estalmat, Burgos

Instituto Cardenal López de Mendoza, Burgos

Año académico 2006-2007

Duración: 2,5 créditos

Grupo de Investigación: Sociedad Castellano Leonesa de Educación

Matemática Miguel de Guzmán (Sección de Burgos).



**ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN LA UBU**

---

Guadalupe López Lurrabaquio  
Instituto Nacional de Investigadores Nucleares, Departamento Síntesis y  
caracterización, México  
Universidad de Burgos  
Ayuda de investigación del Vicerrectorado de Investigación  
Duración: 2 meses  
2007

**OTROS MÉRITOS DE CARÁCTER CIENTÍFICO**

---

María Begoña Torres Cabrera, Eva M. Fernández, Luis Carlos Balbás  
**Sin and endohedral M@Sin silicon clusters as units for cluster  
assembled materials Recent results.**  
Conferencia Impartida  
Universidad de Osnabrüeck  
25/05/2007

María Begoña Torres Cabrera  
**IV Jornadas de presentación e introducción al uso de las bases de  
datos de la Web of Knowledge**  
Fundación para la Ciencia y la Tecnología  
21/11/2007