



GUÍA DOCENTE 2012-2013  
**Cálculo numérico y estadística aplicada**

**1. Denominación de la asignatura:**

Cálculo numérico y estadística aplicada

**Titulación**

Grado en Química

**Código**

5281

**2. Materia o módulo a la que pertenece la asignatura:**

Fundamental

**3. Departamento(s) responsable(s) de la asignatura:**

Departamento de Matemáticas y Computación

**4.a Profesor que imparte la docencia (Si fuese impartida por mas de uno/a incluir todos/as) :**

Luis A. Sarabia, M<sup>a</sup> Sagrario Sánchez



**4.b Coordinador de la asignatura**

Luis A. Sarabia

**5. Curso y semestre en el que se imparte la asignatura:**

Segundo curso, segundo semestre

**6. Tipo de la asignatura: (Básica, obligatoria u optativa)**

Obligatoria

**7. Requisitos de formación previos para cursar la asignatura:**

No se han establecido

**8. Número de créditos ECTS de la asignatura:**

6

**9. Competencias que debe adquirir el alumno/a al cursar la asignatura**

Transversales (de acuerdo con la memoria del título)

T1: Demostrar capacidad de análisis y de síntesis.

T2: Resolver problemas de forma efectiva.

T3 Poseer conocimientos de informática relativos al ámbito de estudio.

T4 Demostrar habilidades para la planificación y organización.

T5 Poseer la capacidad de tomar decisiones.

T6 Gestionar adecuadamente la información.

T8 Expresarse correctamente (tanto de forma oral como escrita) en castellano.

T9 Aprender de forma autónoma.

T10 Demostrar capacidad de liderazgo.

T11 Adquirir motivación por la calidad.

T17 Desarrollar el razonamiento crítico.

T18 Trabajar en equipo.

T19 Comprometerse con la ética y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.

T20 Adquirir o poseer las habilidades básicas en TIC (Tecnologías de la Información y Comunicación).

T21 Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.



T22 Cualquier otra competencia derivada de la legislación vigente.

Genéricas (de acuerdo con la memoria del título)

G1 Demostrar conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la química.

G2 Resolver problemas cuantitativos y cualitativos según modelos previamente desarrollados.

G3 Reconocer y analizar nuevos problemas dentro y fuera del ámbito de la química y plantear estrategias para solucionarlos.

G4 Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química.

G5 Saber implementar buenas prácticas científicas de medidas y experimentación.

G6 Procesar y computar datos, en relación con la información y datos químicos.

G12 Interpretar datos procedentes de observaciones y medidas de laboratorio en términos de significado y la teoría que soporta.

G14 Utilizar correctamente los métodos inductivo y deductivo en el ámbito de la química.

G16 Relacionar la química con otras disciplinas.

G17 Realizar cálculos y análisis de error con utilización correcta de magnitudes y unidades.

G18 Ser capaz de realizar y presentar informes científicos tanto de forma oral como escrita ante una audiencia.

Específicas (de acuerdo con la memoria del título)

E18 Aplicar la metrología a procesos y productos químicos, incluyendo la gestión de la calidad.

E19 Aplicar la relación funcional como modelo de fenómenos químicos y como herramienta para su análisis.

E20 Aplicar los métodos matemáticos y estadísticos para validar modelos a partir de datos experimentales y optimizar productos y procesos químicos.

E21 Adquirir las bases estadísticas necesarias para evaluar la validez y la incertidumbre en las determinaciones químicas.



## 10. Programa de la asignatura

| 10.1- Objetivos docentes                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| O1. Comprender y manejar operativamente las herramientas computacionales y de diseño de experimentos para el planteamiento y resolución de problemas en el ámbito científico, particularmente químico.<br>O2. Diseñar una simulación.<br>O3. Extraer la información relevante mediante filtrado de señales.<br>O4. Manejar software específico.<br>O5. Diseñar un experimento por su finalidad.<br>O6. Interpretar los resultados experimentales en el contexto del problema planteado.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
| 10.2- Unidades docentes (Bloques de contenidos)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| <b>Introducción a la teoría y aplicaciones de la estadística</b><br>-Regresión multivariante.<br>-Métodos robustos, no paramétricos y de aleatorización.<br><b>Introducción al diseño de experimentos</b><br>-Experimentos de cribado y factoriales.<br>-Métodos de superficie de respuesta.<br>-Optimización experimental.<br><b>Métodos numéricos de optimización</b><br>Métodos iterativos en una y varias variables<br><b>Tratamiento de datos experimentales mediante computación</b><br>-Tratamiento de señales. Relación señal/ruido. Filtros de Savitzky-Golay.<br>-Aplicación de la derivada para mejorar la calidad de la señal.<br><b>Simulación</b><br>Método Monte Carlo: simulación. Muestreador basado en Cadenas de Markov (MCMC)<br><b>Análisis y propagación de errores de datos experimentales</b><br>-Procedimiento analítico.<br>-Procedimiento estadístico. |



### 10.3- Bibliografía

#### BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Box, Hunter, Hunter, (2008) Estadística para Investigadores. Diseño, innovación y descubrimiento, 2º ed., Reverté,

Brown, Tauler, Walczak (Eds), (2009) Comprehensive Chemometrics. Chemical and Biochemical data analysis, Elsevier, Amsterdam,

D.McCormick, A. Roach, (1987) Measurement, Statistics and Computation, John Wiley & Sons, New York,

J. Nocedal, S. Wright, (2006) Numerical optimization, Springer, New York,

J.S. Liu, (2001) Monte Carlo Strategies in Scientific Computing, Springer Verlag, New York,

Ullmann, (2007) Modelling and simulation, Wiley VCH, Weinheim,

W.L. Martínez, A.R. Martínez, (2008) Computational statistics handbook with Matlab, 2º ed., Chapman&Hall-CRC, Boca Raton,

W.W. Hines, D.C. Montgomery, (1980) Probability and Statistics in engineering and management science, Wiley,

#### 11. Metodología de enseñanza y aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante:

La asignatura se desarrolla intercalando los fundamentos teóricos y prácticos necesarios para la resolución de problemas.

Este carácter acentuadamente práctico implica el uso de herramientas informáticas profesionales específicas para los objetivos fijados (Statgraphics, NemrodW, Matlab).

Una vez comprendidos los fundamentos teóricos y comprobado que se han aplicado correctamente para la resolución del problema propuesto, seguirá un debate-puesta en común de los resultados alcanzados, las conclusiones obtenidas y la dirección a seguir, si el problema se plantea como tal, lo cual permitirá ir avanzando en la construcción del conocimiento necesario.



UNIVERSIDAD DE BURGOS  
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS Y COMPUTACIÓN

| Metodología                        | Competencia relacionada                                                  | Horas presenciales | Horas de trabajo | Total de horas |
|------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------|--------------------|------------------|----------------|
| Clases teóricas                    | T1,T2,T4-T6, T8-T11, T17,T19,T21,T22. G1-G5, G12, G14, G16-G18. E18-E21. | 12                 | 24               | 36             |
| Clases prácticas                   | T1-T6, T8-T11, T17,T18-T22 G1-G6,G12,G14,G16-G18 E18-E21                 | 18                 | 24               | 42             |
| Seminarios, Tutorías               | T1-T3, T6, T8, T10, T11, T17-T22. G1-G6, G12, G16-G18. E18-E21.          | 4                  | 4                | 8              |
| Realización de trabajos e informes | T1-T3, T6, T8, T10, T11, T17-T22. G1-G6, G12, G16-G18. E18-E21.          | 2                  | 16               | 18             |
| Exposición y debate de trabajos    | T1, T8,T17. G1-G6, G12, G16-G18. E18-E21.                                | 12                 | 16               | 28             |
| Pruebas escritas individuales      | Todas                                                                    | 6                  | 12               | 18             |
| <b>Total</b>                       |                                                                          | 54                 | 96               | 150            |



## 12. Sistemas de evaluación:

**Evaluación continua en los términos aprobados por la Facultad de Ciencias.**  
**La evaluación de la \"Participación en las sesiones presenciales\" no es recuperable en segunda convocatoria.**  
**Para eliminar materia por bloques conceptuales se ha de alcanzar al menos un 3 (sobre 10) en el bloque correspondiente.**

| Procedimiento                                                                                     | Peso en la calificación final |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------|
| Participación en las sesiones presenciales (clases teórico-prácticas, seminarios, tutorías, etc.) | 20 %                          |
| Realización de trabajos y presentación de informes                                                | 20 %                          |
| Pruebas escritas individuales presenciales                                                        | 40 %                          |
| Resolución de ejercicios y casos prácticos                                                        | 20 %                          |
| <b>Total</b>                                                                                      | <b>100 %</b>                  |

## Evaluación excepcional, si procede:

Examen presencial de cuestiones y problemas

## 13. Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial:

Los recursos se irán poniendo a disposición de los estudiantes a lo largo del desarrollo de la materia.  
Se mantendrá una atención personalizada durante las horas de tutoría establecidas por cada docente.

## 14. Calendarios y horarios:

Los que establezca la Facultad

## 15. Idioma en que se imparte:

Español