



GUÍA DOCENTE 2013-2014
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^a 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. O2. Diseñar una simulación. O3. Extraer la información relevante mediante filtrado de señales. O4. Manejar software específico. O5. Diseñar un experimento por su finalidad. O6. Interpretar los resultados experimentales en el contexto del problema planteado.



10.2- Unidades docentes (Bloques de contenidos)
Bloque 1. Regresión y Diseño de Experimentos Introducción a la teoría y aplicaciones de la estadística -Regresión univariante. Aplicación al calibrado y a la comparación de métodos. -Regresión multivariante lineal y no lineal. Introducción al diseño de experimentos -Experimentos de cribado y factoriales. -Métodos de superficie de respuesta. -Optimización experimental. Bloque 2. Métodos Computacionales Métodos numéricos de optimización Métodos iterativos en una y varias variables. Tratamiento de datos experimentales mediante computación -Tratamiento de señales. Relación señal/ruido. Filtros de Savitzky-Golay. -Aplicación de la derivada para mejorar la calidad de la señal. Simulación Método Monte Carlo: simulación. Muestreador basado en Cadenas de Markov (MCMC).
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 por completo en un laboratorio de computación, 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.

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	22	35	57
Seminarios, Tutorías	T1-T3, T6, T8, T10, T11, T17-T22. G1-G6, G12, G16-G18. E18-E21.	10	4	14
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.	2	5	7
Pruebas escritas individuales	Todas	6	12	18
Total		54	96	150

12. Sistemas de evaluación:

Las pruebas escritas presenciales e individuales permiten eliminar materia por bloques conceptuales. Para que sea de aplicación, se ha de alcanzar al menos un 3 (sobre 10) en el bloque correspondiente.

Todos los procedimientos son recuperables en segunda convocatoria.

Para los estudiantes con más de 8 en la primera convocatoria que deseen optar a mejorar esa calificación en la segunda convocatoria, se procederá de la misma manera que para la evaluación excepcional. Si se realiza la prueba correspondiente, la calificación será la mayor de ambas.

Procedimiento	Peso primera convocatoria	Peso segunda convocatoria
Realización de trabajos y presentación de informes	30 %	30 %
Pruebas escritas individuales presenciales	40 %	40 %
Resolución de ejercicios y casos prácticos	30 %	30 %
Total	100 %	100 %

Evaluación excepcional:

Examen presencial individual de cuestiones y problemas con o sin la ayuda de software específico.

Se realizará en la misma fecha, hora y lugar que las convocatorias no excepcionales, y consistirá en:

- la resolución de ejercicios o problemas (40%),
- la respuesta justificada a preguntas sobre los fundamentos de las técnicas usadas (40%),



- presentación y discusión de un caso de estudio que le habrá sido entregado con anterioridad (20%).

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