



GUÍA DOCENTE 2023-2024
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/a que imparte la docencia (Si fuese impartida por más de uno/a incluir todos/as) :

María Sagrario Sánchez

4.b Coordinador/a de la asignatura

MARÍA SAGRARIO SÁNCHEZ PASTOR

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/la estudiante al cursar la asignatura

BÁSICAS (de acuerdo con la memoria del título)

B1

Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio.

B2

Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio.

B3

Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.

B4

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

B5

Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

GENERALES (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 Adquirir habilidad para evaluar, interpretar y sintetizar 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 Realizar, presentar y defender informes científicos tanto de forma escrita como oral ante una audiencia.

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.

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 Cualquier otra competencia derivada de la legislación vigente.

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.

ASPECTOS GENERALES

En la página web del Título se encuentra disponible la vinculación entre los objetivos ODS y las competencias del Título: <https://www.ubu.es/grado-en-quimica/informacion-basica/objetivos-y-competencias>.



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- Acceso a la Bibliografía Recomendada desde Leganto
https://leganto.ubu.es/leganto/public/34BUC_UBU/lists?courseCode=5281&auth=SAML



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

La asignatura se desarrolla mayoritariamente 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. G1-G5, G12, G14, G16-G18. E18-E21.	12	24	36
Clases prácticas	T1-T6, T8-T12, T17,T18-T21. G1-G6,G12,G14,G16 -G18 E18-E21	22	35	57
Seminarios, debate de trabajos	T1-T3, T6, T8, T11, T17-T21. G1-G6, G12, G16-G18. E18-E21.	12	4	16
Realización de trabajos e informes	T1-T3, T6, T8, T11, T17-T21. G1-G6, G12, G16-G18. E18-E21.	2	18	20



Pruebas escritas individuales	Todas	6	15	21
Total		54	96	150

12. Sistemas de evaluación:

Como no puede ser de otra manera, la evaluación se rige en todos sus términos por el Reglamento de Evaluación de la Universidad de Burgos.

Aspectos particulares para esta asignatura:

-Las pruebas escritas presenciales e individuales permiten eliminar materia por bloques conceptuales. Para que sea de aplicación, se ha de alcanzar al menos un 4 (sobre 10) en el bloque correspondiente.

-Todos los procedimientos son recuperables en segunda convocatoria.

-Para los estudiantes con primera convocatoria aprobada que deseen optar a mejorar la calificación en la segunda convocatoria, se procederá de la misma manera que para la evaluación excepcional. Lo mismo para los estudiantes que no sigan los procedimientos de evaluación continua.

-Cualquier estudiante puede ser convocado para la realización de alguna prueba oral en cualquiera de los procedimientos.

Siguiendo las instrucciones del vicerrectorado, el sistema de evaluación para estudiantes de intercambio será modificado en el supuesto de que los calendarios académicos de las universidades de origen y de destino no sean coincidentes.

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 habrá sido entregado con anterioridad (20 %).

La calificación mínima requerida para aprobar es de cinco sobre diez.

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, que se encuentran publicados en la hoja Web del título.

15. Idioma en que se imparte:

Español