



Universidad  
de Alcalá

GUÍA DOCENTE

# CÁLCULO NUMÉRICO Y ESTADÍSTICA APLICADA (660005)

**Grado en Química  
Universidad de  
Alcalá**

**Curso Académico  
2022/2023**

1º Curso – 2º Cuatrimestre

## GUÍA DOCENTE

Nombre de la asignatura:	<b>CÁLCULO NUMÉRICO Y ESTADÍSTICA APLICADA</b>
Código:	<b>660005</b>
Titulación en la que se imparte:	<b>GRADO EN QUÍMICA</b>
Departamento y Área de Conocimiento:	<b>FÍSICA Y MATEMÁTICAS/ ÁREA DE MATEMÁTICA APLICADA</b>
Carácter:	<b>BÁSICO</b>
Créditos ECTS:	<b>6 teóricos</b>
Curso y cuatrimestre:	<b>1º curso, 2º cuatrimestre</b>
Profesorado:	<b>Dr. Carlos Hermoso Ortiz (Teoría y Prácticas) Dr. Rafael Florencio Díaz (Teoría) D. Juan Ramón Herreros Rodríguez de Guzmán (Prácticas)</b>  <b>Coordinador: Dr. Carlos Hermoso Ortiz</b>
Horario de Tutoría:	
Idioma en el que se imparte:	<b>Español</b>

### 1a. PRESENTACIÓN

La asignatura de Cálculo Numérico y Estadística Aplicada debe servir para profundizar en la formación matemática proporcionada con anterioridad por la asignatura de Matemáticas, cursada en el primer cuatrimestre.

Así mismo, debe servir para mostrar la utilidad de las herramientas matemáticas para la resolución efectiva de diversos problemas prácticos que surgen en el resto de las materias que se estudian en el grado de Química.

Es importante también mostrar la relación entre las dos partes de la asignatura (el cálculo numérico y la estadística).

Finalmente, dada la variedad de los contenidos de la asignatura, debe resultar claro que se requerirán grandes dosis de esfuerzo personal por parte del alumno, esfuerzo que dependerá en buena medida de la preparación previa de cada uno.

#### Prerrequisitos y Recomendaciones

Para cursar la asignatura serán necesarios muchos de los conocimientos sobre álgebra y cálculo que se imparten en la asignatura de Matemáticas del primer cuatrimestre.

## 2. COMPETENCIAS

### Competencias genéricas:

1. Capacidad de lectura comprensiva, análisis y síntesis.
2. Desarrollo de habilidades para la búsqueda de información, selección de documentación en bases de datos y buscadores académicos relacionados con las ciencias químicas.
3. Iniciación en la capacidad de argumentación con el apoyo de los libros de textos y otras referencias proporcionadas en la asignatura
4. Capacidad para comunicar ideas y expresarse de forma correcta oral y escrita
5. Fortalecer la habilidad de aprendizaje autónomo y de trabajo en equipo.

### Competencias específicas:

1. Analizar, proponer y discutir modelos numéricos y estadísticos para explicar distintos fenómenos relacionados con la Química.
2. Estimar el error de un valor de una magnitud y su margen de fiabilidad después de un proceso de medida experimental, o después de aproximar su valor mediante un método numérico.
3. Estimar el valor de parámetros físicos y químicos y sus márgenes de error mediante la medida experimental de otras magnitudes relacionadas con ellas a través de funciones lineales o no lineales, así como elegir el mejor algoritmo de ajuste de acuerdo a las variables y a las funciones implicadas en el proceso.
4. Manejar programas informáticos de estadística para el tratamiento de datos, aplicar el procedimiento adecuado en cada situación e interpretar correctamente los resultados obtenidos.
5. Llevar a la práctica diferentes algoritmos para la resolución de problemas matemáticos, haciendo uso de programas de cálculo numérico y prestando atención a la relevancia de esos problemas en su aplicación tanto a la estadística como a diversos problemas relacionados con las ciencias químicas.

### 3. CONTENIDOS

#### Parte 1. Cálculo Numérico.

##### **Tema 0. Introducción al Cálculo Numérico.**

El problema del cálculo numérico. Error absoluto, relativo; cifras significativas. Representación en coma flotante. Condicionamiento de un problema. Propagación de errores.

##### **Tema 1. Solución de ecuaciones de una variable. Caso de sistemas.**

Método de Newton-Raphson. Estudio del error. Método de Jacobi para sistemas de ecuaciones lineales.

##### **Tema 2. Interpolación polinómica.**

El problema de la interpolación. Existencia y unicidad del polinomio interpolador. Interpolación de Lagrange. Interpolación mediante diferencias divididas de Newton.

##### **Tema 3. Integración numérica e introducción a la resolución numérica de ecuaciones diferenciales.**

Regla del trapecio. Regla de Simpson. Estudio del error. Método de Euler.

#### Parte 2. Estadística.

##### **Tema 4. Estadística descriptiva.**

Elementos del estudio estadístico. Variables estadísticas unidimensionales. Distribución de frecuencias. Representaciones gráficas. Medidas de posición, dispersión y forma.

**Tema 5. Modelos de regresión.** Variables estadísticas bidimensionales. Correlación. Regresión lineal por mínimos cuadrados. Modelos de regresión exponencial, logarítmico y polinomial.

**Tema 6. Probabilidad.** Definición de Probabilidad y sus propiedades. Independencia de sucesos. Probabilidad condicionada. Teorema de la probabilidad total. Teorema de Bayes.

##### **Tema 7. Variables aleatorias unidimensionales discretas y continuas.**

Variables aleatorias unidimensionales. Definiciones y elementos característicos. Principales distribuciones de probabilidad de variables aleatorias discretas y continuas.

##### **Tema 8. Inferencia Estadística.**

Estimación puntual. Propiedades de los estimadores. Estimadores más usuales. Estimación por intervalos. Intervalos de confianza más usuales. Contrastes de hipótesis.

Bloques de contenidos (se pueden especificar los temas si se considera necesario)	Total de clases, créditos u horas
Cálculo numérico	• 27 horas
Estadística aplicada	• 34 horas

#### 4. METODOLOGÍAS DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE. ACTIVIDADES FORMATIVAS

##### 4.1. Distribución de créditos (especificar en horas)

Número de horas presenciales: <b>64</b>	Clases teóricas, teórico-prácticas, prácticas en gran grupo o grupos más reducidos: 61h Realización de exámenes: 3h
Número de horas del trabajo propio del estudiante: <b>86</b>	Estudio autónomo: estudio independiente, manejo del software de la asignatura, ejercicios
Total horas	150

##### 4.2. Estrategias metodológicas, materiales y recursos didácticos

Clases presenciales	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Clases teóricas o teórico-prácticas en grupos grandes o en grupos reducidos</li> <li>• Clases expositivas para presentar tema (exposición), introducir a los alumnos en una temática compleja, realizar conclusiones</li> <li>• Clases para el desarrollo, aplicación, profundización de conocimientos a través de diferentes estrategias: estudio de casos, resolución problemas, debates, puzzles de grupos.....</li> <li>• Tutorías colectivas</li> <li>• Clases prácticas en aulas de informática</li> </ul>
---------------------	---

Trabajo autónomo	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Lecturas</li> <li>• Realización de actividades: ejercicios, manejo de software específico de la asignatura, búsqueda de información.</li> </ul>
Tutorías individualizadas	Atención a los estudiantes individualmente para la celebración de tutorías.
Recursos didácticos	<p>Sistemas de cálculo numérico y estadístico para realizar, en el laboratorio de informática, las prácticas de los distintos temas.</p> <p>Se podrá utilizar alguna plataforma de aula virtual como Moodle o Blackboard</p>

## 5. EVALUACIÓN: Procedimientos, criterios de evaluación y de calificación

### Procedimientos de evaluación

La evaluación se hará de acuerdo con la normativa vigente. El alumno tendrá derecho a disponer de dos convocatorias, una ordinaria y otra extraordinaria. La convocatoria ordinaria estará basada en la evaluación continua, salvo en el caso de aquellos estudiantes a los que se haya reconocido el derecho a la evaluación final.

Para acogerse a la evaluación final, el estudiante tendrá que solicitarlo por escrito al Director del Centro en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura, explicando las razones que le impiden seguir el sistema de evaluación continua. El director de centro deberá valorar las circunstancias alegadas por el estudiante y tomar una decisión motivada. Transcurridos 15 días hábiles sin que el estudiante haya recibido respuesta expresa por escrito a su solicitud, se entenderá que ha sido aceptada. El estudiante deberá notificar, por escrito, esta circunstancia al profesor de la asignatura a la mayor brevedad posible y, en todo caso, durante las dos semanas posteriores al vencimiento de los plazos arriba indicados.

En el caso de aquellos estudiantes que por razones justificadas no tengan formalizada su matrícula en la fecha de inicio del curso o del periodo de impartición de la asignatura, el plazo indicado comenzará a computar desde su incorporación a la titulación.

- En el caso de la evaluación final, el alumno realizará un único examen a final de cuatrimestre. Dicho examen abarcará la totalidad de los contenidos de la asignatura. La nota obtenida en dicho examen será la nota final del alumno.
- Los alumnos que sigan evaluación continua no podrán realizar el examen final. En este caso, la nota final del alumno será la suma de las notas obtenidas en una serie de controles que se realizarán a lo largo del cuatrimestre.

Independientemente del sistema de evaluación elegido, el alumno tendrá derecho, en caso de no superar la convocatoria ordinaria, a realizar un examen final en la convocatoria extraordinaria. Dicho examen se realizará en un laboratorio de informática y abarcará la totalidad de los contenidos de la asignatura.

## Criterios de evaluación

Se valorarán fundamentalmente los siguientes aspectos:

- Posesión y comprensión de conocimientos
- Capacidad de aplicación de los conocimientos adquiridos
- Interpretación de resultados y resolución de problemas
- Capacidad de observación y de razonamiento crítico
- Participación activa en el desarrollo de la asignatura, fundamentalmente en las clases de seminarios y problemas, y en las tutorías grupales

## Criterios de calificación

Para aprobar la asignatura mediante la evaluación continua en la convocatoria ordinaria, se deberá demostrar que se han adquirido las competencias fijadas en la asignatura. Teniendo en cuenta esto, durante el curso se realizarán dos pruebas parciales (una correspondiente a la parte de Cálculo Numérico y la otra a la parte de Estadística Aplicada), cada una con peso del 30%, y un entregable con resolución de ejercicios prácticos de cada una de las partes con un peso del 20% en cada una de ellas. La fecha de realización de las pruebas y su contenido preciso serán indicados al principio de cuatrimestre.

La nota final será la media ponderada de los dos exámenes parciales y los dos entregables. Si la nota final es inferior a 5, se considerará al alumno como suspenso.

El alumno que no supere la asignatura por el sistema de evaluación continua tendrá que presentarse al correspondiente examen extraordinario (convocatoria de junio), que incluirá toda la materia del programa.

La calificación de esta convocatoria seguirá los mismos criterios que la ordinaria. En el caso de evaluación final, tanto en la convocatoria ordinaria como en la extraordinaria, la nota obtenida en el examen será la nota final del alumno.

Se adoptará la escala de calificaciones, según el R.D 1125/2003 que regula el Suplemento al Título.



## 6. BIBLIOGRAFÍA

### Bibliografía Básica

1. Kincaid, D., Cheney, W.: Análisis Numérico: Las matemáticas del cálculo científico. Addison-Wesley Iberoamericana, 1994.
2. Burden, R.L., Faires, J.D.: Análisis numérico (7ª edición). International Thomson Editores, 2002. Miller, J. N., Miller, J. C., Estadística y quimiometría para química analítica, Prentice Hall, 2002.
3. Pérez, C. (2002): Estadística Práctica con Statgraphics. Ed. Prentice Hall.
4. Milton, J.S. (2001), Estadística para Biología y Ciencias de la Salud. 3ª Edición. Interamericana. McGraw-Hill, Madrid.
5. Martín, A., Luna del Castillo J. de D. (2004), Bioestadística para las Ciencias de la Salud. 5ª Edición. Ediciones Norma. ISBN: 978-84-8451-018-5.
6. Antonio José Saez Castillo - Métodos estadísticos con R y R commander. Descargable gratuitamente en la dirección web: <http://cran.r-project.org/doc/contrib/Saez-Castillo-RRCmdrv21.pdf>
7. Statgraphics Plus 4 - Guía Práctica Para Usuarios - Spanish Edition. Diego Delgado, Juan Llovet, Julian Martinez. Anaya Multimedia

### Bibliografía Complementaria

8. Bioestadística: Métodos y Aplicaciones (libro electrónico). <http://www.bioestadistica.uma.es/libro>
9. Llovet J., Delgado D. y Martínez J. (2000), Guía Práctica para usuarios. Statgraphics Plus 4.1. Anaya.
10. Montgomery, D., Runger, G., Probabilidad y estadística aplicadas a la ingeniería, Limusa Wiley, 2002.
11. Verzani J. (2002), SimpleR - Using R for Introductory Statistics. Versión electrónica en <http://www.math.csi.cuny.edu/Statistics/R/simpleR>.

***La Universidad de Alcalá garantiza a sus estudiantes que, si por exigencias sanitarias las autoridades competentes impidieran la presencialidad total o parcial de la actividad docente, los planes docentes alcanzarían sus objetivos a través de una metodología de enseñanza-aprendizaje y evaluación en formato online, que retornaría a la modalidad presencial en cuanto cesaran dichos impedimentos.***