

CÁLCULO NUMÉRICO Y ESTADÍSTICA APLICADA

Curso 2014/2015

(Código: 61032014)

1. PRESENTACIÓN DE LA ASIGNATURA

Es una Asignatura que se imparte desde el Departamento de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas, pertenece al 2º Curso del Grado en Química (1er. semestre) y es de carácter obligatorio. Le corresponden 5 créditos ECTS (125 h.) de los que 3,5 son de formación teórica y 1,5 de formación práctica.

Los objetivos generales son los de conocer y saber aplicar a un nivel elemental y en casos concretos una serie de herramientas matemáticas básicas, pertenecientes al cálculo numérico y al tratamiento estadístico de datos, que son de uso común en Química.

Las tareas de evaluación continua, PEC (Prueba de evaluación continua y Prácticas), tienen un peso importante en esta asignatura. También se contempla en las prácticas la adquisición complementaria de conocimientos para resolver algunos problemas típicos utilizando paquetes/ hojas de cálculo integradas en ordenadores personales.

Es muy importante para el estudiante que comprenda y aprecie el valor indispensable de todas estas materias en la resolución de problemas prácticos de diversa índole dentro de la Química.

En la evaluación se tendrán en cuenta las siguientes actividades: una PEC (en dos partes) + Prácticas + Examen escrito convencional (Prueba Personal), con porcentajes que se detallan más adelante. El examen escrito debe realizarse con material auxiliar (material escrito -textos, etc.- + tablas matemáticas + calculadora).

2. CONTEXTUALIZACIÓN EN EL PLAN DE ESTUDIOS

La asignatura Cálculo Numérico y Estadística Aplicada pertenece a los Estudios de Grado en Química por la UNED y tiene un material didáctico escrito (Unidades Didácticas o UUDD) como soporte para su docencia. Esta asignatura tiene pues que ver con la aplicación práctica de técnicas matemáticas a la resolución de problemas de interés en Química.

El lenguaje matemático es la herramienta para comprender los procesos naturales, algo que forma parte del consenso entre todos los científicos desde hace ya muchos años. Si se tiene en cuenta el reducido número de problemas de las ciencias experimentales, en concreto la Química, que son resolubles matemáticamente de forma analítica exacta, incluso en aquellos casos que admiten formulaciones "exactas" (la ecuación de Schrödinger para átomos poli-electrónicos, por ejemplo), la importancia de los métodos numéricos de aproximación para resolverlos es crucial. Como cuestión de interés añadida a todo lo anterior está el carácter experimental de la Química, de lo que se deriva la necesidad del tratamiento de series de datos (experimentales o procedentes de cálculos extensos), faceta ésta que involucra el conocimiento y manejo de herramientas estadísticas.

Por consiguiente, es muy importante que el estudiante de Química conozca, no sólo los principios de las técnicas analíticas clásicas exactas que se imparten en las asignaturas de Matemáticas (I y II) convencionales del Grado, sino también cómo realizar operaciones matemáticas aproximadas y cómo analizar



estadísticamente tales series de datos. Hoy día es impensable que un buen profesional de la Química no conozca y no sepa utilizar estas herramientas, de manera que los conocimientos anteriores sin duda contribuirán a desarrollar la *autonomía* del estudiante dándole tanto una mejor formación integral como una mayor capacidad práctica para abordar los problemas que se le plantearán en el ejercicio de su futura actividad profesional.

Aunque es cierto que el nivel de profundidad y la cantidad de conocimientos a impartir a los que se debería llegar tendrían que ser siempre los máximos posibles, no es menos cierto que la limitación de tiempo a un "semestre" impone severas restricciones a este deseo. Por consiguiente, en esta asignatura se darán una serie de ideas fundamentales sobre determinados temas matemáticos útiles, en consonancia con las directrices del Libro Blanco para los Estudios del Grado en Química (2008). Para esta asignatura se resumen en los siguientes descriptores: (I) Métodos Numéricos; (II) Introducción a la Teoría y Aplicaciones de la Estadística; (III) Análisis y Propagación de Errores de Datos Experimentales; (IV) Simulación y Validación de Métodos ; y (V) Tratamiento de Datos Experimentales Mediante Computación. En el desarrollo de los conocimientos a asimilar aquí se presta especial atención a los aspectos prácticos y aplicados, pero sin olvidar determinadas cuestiones matemáticas formales de principio. Todo ello se complementa con la realización de prácticas en los Centros Asociados que introduzcan al estudiante en el uso de paquetes /hojas de cálculo integrados en ordenador.

Esta asignatura se mantiene en un nivel medio y descansa sobre los fundamentos matemáticos básicos impartidos en Matemáticas I y Matemáticas II, debiéndose considerar como una extensión matemática necesaria que va a beneficiar al estudio del resto de las asignaturas del presente Grado (trabajo en laboratorio cuantificando resultados, realización de cálculos significativos, etc.).

Con el estudio de esta asignatura se va a contribuir a que el estudiante desarrolle las siguientes competencias genéricas de especial importancia en la formación universitaria del Espacio Europeo de Educación Superior (EEES):

- 1.- Desarrollo de procesos cognitivos superiores.
- 2.- Comunicación oral y escrita.
- 3.- Alto grado de autonomía.
- 4.- Trabajo en equipo.
- 5.- Utilización responsable de herramientas informáticas.

En cuanto a la construcción de las competencias específicas cabe reseñar las siguientes:

- 1.- Conocimiento y comprensión de conceptos matemáticos específicos y necesarios para el estudio y la práctica de la Química.
- 2.- Establecimiento de conexiones multidisciplinares que posibiliten un estudio más avanzado y especializado de la Química.
- 3.- Capacidad de relacionar la Química con otras disciplinas.
- 4.- Manejo de modelos abstractos de utilidad en Química.
- 5.- Capacidad para aplicar conocimientos matemáticos a la resolución de problemas prácticos en Química.
- 6.- Habilidad para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química.

Finalmente, para concluir este apartado hay que insistir en el desarrollo por parte del estudiante de un compromiso ético hacia sí mismo y hacia la sociedad en la que vive, para que la integración de todo este conocimiento adquirido sea efectiva y provechosa. La honradez en el estudio y en la realización de trabajos/prácticas/etc. y exámenes deben presidir las actuaciones del estudiante.

3. REQUISITOS PREVIOS REQUERIDOS PARA CURSAR LA ASIGNATURA

La mayor parte de las dificultades que los estudiantes de esta asignatura encuentran no son específicas de esta materia. Tales dificultades tienen su raíz en la falta de maduración de conceptos previos que los estudiantes deberían tener. Algunos de estos conceptos son realmente muy básicos y pertenecen a la enseñanza secundaria. Por tanto, para cursar esta asignatura con el máximo aprovechamiento se recomienda haber cursado las asignaturas de Matemáticas I y II previas, existentes en estos estudios de



Grado. En particular sería útil para el estudiante refrescar sus conocimientos, algunos posiblemente adquiridos durante su periodo en la enseñanza secundaria, en los temas siguientes:

- Análisis Matemático

- Sucesiones y series
- Funciones reales de una variable real (continuidad, diferenciación, integración)
- Funciones de varias variables (derivación parcial, integración multidimensional)
- Series de Fourier
- Ecuaciones diferenciales ordinarias

- Álgebra Lineal:

- Espacios vectoriales
- Matrices
- Determinantes

- Probabilidad y Estadística:

- Histogramas de frecuencias. Valores medios y dispersiones
- Distribuciones binomial y Gaussiana

- Herramientas de Cálculo

- Hoja EXCEL:

- Nomenclatura y manejo de celdas
- Operaciones matemáticas/aritméticas básicas
- Realización de gráficos

- MANEJO EFICIENTE DE CALCULADORA CIENTÍFICO TÉCNICA

4.RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Conocimientos Teóricos Generales

- Interpretar la naturaleza matemática de muchos problemas de interés en Química para poderlos abordar mediante tratamientos aproximados (numéricos y estadísticos).
- Comprender la especial característica de estos tratamientos en contraposición a los desarrollos exactos y, por tanto, del importante papel que juega la estimación de errores en los distintos contextos estudiados.
- Entender la aplicación de los diferentes métodos presentados para poder resolver problemas concretos utilizando materiales de consulta. Se excluye así la memorización de fórmulas.



Conocimientos Prácticos Particulares (destrezas)

Por lo que respecta al Cálculo Numérico:

- Conocer y saber aplicar diferentes métodos numéricos para resolver problemas de ajuste de funciones y para manipular estas aproximaciones obteniendo respuestas significativas a operaciones complicadas del cálculo matemático (interpolaciones, estimación de derivadas y de integrales definidas).
- Conocer y saber aplicar diferentes métodos numéricos para resolver problemas de naturaleza no lineal (ecuaciones, sistemas, diagonalizaciones, etc.), y “simular” numéricamente procesos deterministas (ecuaciones diferenciales).

Por lo que respecta a la Estadística Aplicada:

- Conocer el lenguaje básico de la Estadística y saber aplicar sus conceptos básicos a la caracterización de poblaciones y muestras.
- Formular y verificar hipótesis estadísticas.
- Saber describir conjuntos de resultados experimentales mediante el conocimiento y aplicación de los correspondientes análisis de regresión (lineal y no lineal) y de la varianza, estadística no paramétrica, etc.
- Conocer y saber aplicar técnicas de simulación (Monte Carlo) y de validación (máxima verosimilitud, ANOVA).

Por lo que respecta a la Propagación de errores experimentales:

- Conocer las ideas principales sobre los diferentes tipos de errores que inevitablemente afectan a los procesos de medida experimental, y saber cómo calcularlos y combinarlos para obtener la estimación final de un error total de medida, tanto si los errores parciales proceden de una operación directa como indirecta.

Finalmente, el estudiante deberá familiarizarse con el uso de medios electrónicos de cálculo para resolver problemas (calculadora científico-técnica, computador). En este sentido se recomienda encarecidamente que el estudiante refresque sus (o adquiera) conocimientos de la hoja de cálculo EXCEL paralela o previamente al estudio de la asignatura, herramienta de un uso muy extendido ya hoy día en la enseñanza secundaria y que por su amplia difusión resulta muy adecuada para hacer una primera toma de contacto con el tratamiento de datos mediante computación. Aunque estas actividades EXCEL no van a ser obligatorias se recomienda que el estudiante las realice, tanto por su incidencia final en la evaluación continua de su rendimiento, como por la visión global que le van a dar sobre la asignatura.

En resumen:

El estudiante deberá comprender los principios básicos sobre los que se asientan todas las manipulaciones matemáticas estudiadas. Igualmente deberá ser capaz de aplicar los conocimientos adquiridos a cuestiones y/o problemas concretos (teóricos, numéricos y de trabajo con computador), con una orientación hacia la interpretación de resultados de interés para la Química. También deberá ser capaz de escribir informes, claros y suficientemente concisos, y de utilizar la tecnología informática para realizar cálculos, buscar datos, referencias bibliográficas y demás.

Actitudes

- Apreciar el valor formativo de las herramientas matemáticas estudiadas.
- El estudiante debe observar la gran utilidad de la naturaleza iterativa (aproximaciones sucesivas y error asociado) de los métodos numéricos aproximados, algo derivado del hecho de que la obtención de soluciones analíticas exactas es, por decirlo así, una “rareza” en las ciencias físico-químicas y que está limitada a problemas ideales altamente sencillos.
- Además, el estudiante debe interiorizar el hecho de que los análisis estadísticos difieren, en un asunto de principio, de los análisis probabilísticos: la estadística está relacionada con el estudio *a posteriori* de lo ya realizado, en tanto que la probabilidad está relacionada con la predicción de lo potencialmente posible. Esta distinción le será de mucha ayuda para interpretar correctamente en su momento la Mecánica Cuántica, que es



5. CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA

I. MÉTODOS NUMÉRICOS

1. Ajuste de funciones con polinomios: técnicas de colocación y de mínimos cuadrados.

Este es un capítulo de introducción en el que se presentan dos técnicas básicas de ajuste de funciones dadas por tablas de datos mediante polinomios, la colocación y los mínimos cuadrados, estos últimos desde un punto de vista estrictamente numérico. Se discuten sus ventajas e inconvenientes y se prepara el camino para la materia que se estudiará en los capítulos 2, 3, 7 y 9

2. Ajuste de funciones con polinomios ortogonales.

Los ajustes con polinomios convencionales por mínimos cuadrados presentan algunos problemas de principio (inestabilidad) cuando se utilizan grados altos. Para resolverlos adecuadamente una técnica general es la del desarrollo en funciones ortogonales, en particular polinomios ortogonales. Esto da pie a discutir cuestiones muy generales que serán de utilidad en el estudio de sistemas cuánticos en otras asignaturas (Química-Física) y, además, permite introducir las bases de la integración numérica gaussiana que se estudiará en el capítulo 3. Por otra parte, las cuestiones aquí discutidas son análogas en general a las series de Fourier estudiadas en Matemáticas II, por lo que la similitud de conceptos ayudará en la comprensión de estas nuevas materias.

3. Aplicaciones numéricas básicas.

En este capítulo se hace un uso extensivo de la materia presentada en los dos precedentes para mostrar cómo realizar complicadas operaciones de cálculo reduciéndolas a combinaciones de las cuatro operaciones aritméticas básicas. Se estudian así la interpolación (y extrapolación), la derivación, y diferentes técnicas de integración numérica.

4. Resolución de ecuaciones y sistemas.

Se abordan aquí cuestiones elementales de la resolución de ecuaciones no lineales y de sistemas de ecuaciones (lineales y no lineales). Es un capítulo que no depende directamente de los tres anteriores, pero que completa las aplicaciones numéricas básicas y que tiene muchas aplicaciones en problemas químico-físicos (mínimos y estabilidad de sistemas, nodos de funciones atómicas, etc.). Con los tratamientos no lineales estudiados aquí se podrá abordar en su momento el caso especialmente importante de los sistemas lineales homogéneos que se deja para el capítulo 9.

II. INTRODUCCIÓN A LA TEORÍA Y APLICACIONES DE LA ESTADÍSTICA

5. Distribuciones de probabilidad.

Este capítulo presenta las ideas básicas de probabilidad y estadística, dos temas que no han formado parte de las asignaturas de Matemáticas I y II del Grado. Es pues un capítulo muy detallado y que contiene la nomenclatura y el lenguaje básicos para poder estudiar los capítulos de aplicación que siguen (6, 7, 8 y 10). El estudiante encontrará conceptos como variable aleatoria, media, desviación típica, funciones de distribución, etc. El interés se centra por tanto en el estudio de lo que se denominan poblaciones (conjuntos teóricos muy grandes de datos) y los conceptos discutidos son de importancia primordial en estudios cuánticos y estadísticos de la materia.

6. Muestreo, estimación y decisión estadística.

Se pasa aquí al estudio de pequeñas colecciones de datos extraídos de poblaciones, es decir en el caso práctico de datos procedentes de experimentos. Se estudia cómo seleccionarlos y cómo estimar con ellos las características (media, desviación típica, etc.) de la población de la que proceden. Se presta atención así a la verificación de hipótesis estadísticas y a la teoría de pequeñas muestras. Es un capítulo fundamental para abordar los capítulos 7 y 10.

7. Correlación, regresión y estadística no paramétrica.

Este capítulo analiza el concepto de correlación entre variables aleatorias y cómo cuantificarlo. Se estudian diferentes tipos de relaciones funcionales (empíricas) entre variables que aparecen con frecuencia en la práctica experimental y, para dotarlas de significación, se vuelve sobre el ajuste de mínimos cuadrados, pero ahora desde un punto de vista estadístico. Como extensión de estas técnicas se consideran también los enfoques, muy utilizados en la actualidad, de la estadística no paramétrica que dan soluciones alternativas y complementarias a las tradicionales. Se completa en el capítulo 10 con cuestiones



de la denominada estadística robusta.

III. ANÁLISIS Y PROPAGACIÓN DE LOS ERRORES EXPERIMENTALES

8. El tratamiento de errores en datos experimentales.

Un proceso de medición experimental está inevitablemente ligado a la presencia de errores de diversos tipos que afectan a los resultados obtenidos. El objetivo de este capítulo es identificar tales tipos y aprender a calcularlos primero y combinarlos después para dar una estimación final del error global que afecta a una medición. Este capítulo utiliza los conceptos estadísticos previos y es fundamental para la interpretación de resultados obtenidos en el laboratorio químico.

IV. SIMULACIÓN Y VALIDACIÓN DE MÉTODOS

9. Métodos avanzados de cálculo y de simulación numérica.

Como técnicas adicionales de cálculo numérico se presentan aquí varias extensiones de interés como son los polinomios ortogonales trigonométricos para ajustar funciones periódicas, la resolución numérica de: ecuaciones diferenciales ordinarias, y la diagonalización de matrices reales y simétricas. Estas técnicas encuentran una gran utilidad en el análisis de señales, en el estudio de trayectorias de partículas (clásicas) y en los cálculos de estructuras moleculares. Sin perjuicio de que la materia discutida aquí pueda formar parte del examen escrito, este capítulo puede suministrar ejemplos significativos más elaborados para el trabajo de las prácticas de la asignatura.

10. Métodos estadísticos de simulación y validación.

Este capítulo completa con técnicas útiles y de gran importancia los conocimientos estadísticos vistos anteriormente. Se estudian así la integración Monte Carlo, algo a medio camino entre el cálculo numérico y la estadística, diferentes métodos de minimización para tratar datos y, finalmente, denominada técnica del análisis de la varianza (ANOVA) que se ha convertido en una herramienta de uso generalizado en el análisis de datos experimentales. Como en el caso del capítulo 9 y con las precisiones allí hechas, todo lo visto aquí se presta igualmente a la realización de prácticas.

V. TRATAMIENTO DE DATOS EXPERIMENTALES MEDIANTE COMPUTACIÓN

11. Prácticas (opcionales).

Las prácticas a realizar por los estudiantes, bajo la supervisión del profesorado formado por los Tutores Intercampus, versarán sobre las prestaciones básicas que ofrecen los paquetes o programas informáticos de cálculo de uso común (hojas de cálculo). Estos permiten representar gráficamente datos, realizar ajustes y operaciones matemáticas de diversos tipos, incluyendo en ello cálculos numéricos y determinaciones estadísticas. Todas las Prácticas llevarán su guión correspondiente, con la formulación del problema, la presentación teórica del método a utilizar (o la referencia oportuna al texto base) y las cuestiones a responder. La herramienta informática a utilizar por razones de uniformidad será la hoja de cálculo EXCEL.

El conjunto de las prácticas se conformará en un informe final, cuyo formato se comunicará oportunamente, acorde con las cuestiones señaladas en cada formulación de las prácticas. La realización de estas Prácticas puede ser llevada a cabo por cada estudiante en su domicilio durante el periodo de tiempo lectivo que se indicará durante el curso. El informe se deberá entregar al Tutor Intercampus correspondiente para su calificación, entrega que se realizará dentro del sistema informático ALF que contiene el curso virtual de la asignatura.

6.EQUIPO DOCENTE

- [LUIS MARIANO SESE SANCHEZ](#)



- [MANUEL CRIADO SANCHO](#)

7.METODOLOGÍA Y ACTIVIDADES DE APRENDIZAJE

Se trata de una materia fundamentalmente orientada a las cuestiones de índole práctica, aunque sin abandonar el razonamiento teórico. No será necesario memorizar fórmulas, pero sí habrá que saber aplicarlas. Por ello se permitirá el uso del material auxiliar en la sesión de examen (ver más adelante). En este sentido y teniendo en cuenta los aspectos particulares de la enseñanza universitaria a distancia que desarrolla la UNED el elemento básico será el libro de texto (Unidades Didácticas), el cuál ha sido especialmente diseñado para acometer la tarea del autoestudio de esta asignatura. Este texto contiene el desarrollo completo de los contenidos, con ejercicios ilustrativos de los conceptos y con secciones de problemas de aplicación, todos ellos completamente resueltos. La utilización continua de este material escrito es decisiva para lograr los objetivos de aprendizaje y alcanzar las competencias reseñadas anteriormente. En este texto se encontrará también el fundamento teórico de las Prácticas con computador y paquetes / hojas de cálculo.

Además, el estudiante deberá familiarizarse con el uso de tablas matemáticas estándar, sobre todo para las cuestiones de Estadística, y con el de calculadoras de escritorio (programables o no, aunque en el examen sólo se autorizará el uso de calculadoras científico-técnicas no programables).

La asignatura contará asimismo con la herramienta complementaria de la virtualización de determinados contenidos en la plataforma educativa ALF. En este espacio de la red y en los correspondientes foros de discusión los estudiantes podrán interactuar entre ellos y con el Equipo Docente. El equipo docente moderará las posibles discusiones, o dudas planteadas, sobre los contenidos de la asignatura y podrá incorporar actividades recomendadas, resolución de dudas, etc., de una manera efectiva que alcance a los estudiantes sin importar su localización geográfica. Dentro de la virtualización de la asignatura el estudiante encontrará en ALF:

Inicio

- La página de bienvenida con la presentación del Equipo Docente y de la asignatura.

DOCUMENTOS

- Las Guías (parte I y parte II) de orientación de la asignatura (I) y de su estudio (II). En la segunda parte se podrán encontrar las directrices temporales y didácticas para la preparación de la asignatura.
- La PEC propuesta.
- Exámenes de cursos anteriores.
- Otros contenidos (fe de erratas del texto base, actualizada con regularidad cuando esto sea necesario; indicaciones para la solución de la PEC; enunciados de Prácticas).
- Materiales relevantes de cursos anteriores (soluciones PEC, Prácticas, etc.).

Comunicación

- Correo postal y electrónico.
- Foros: Uno por cada Capítulo de la asignatura (responsabilidad del Tutor Intercampus correspondiente) –en total 10-; un foro de consultas generales al Equipo Docente; un foro de estudiantes (no regulado por el Equipo Docente); uno por cada grupo de tutoría Intercampus; etc.

Actividades

- Actividades complementarias y orientaciones.

Se insta a los estudiantes a hacer un uso responsable y meditado de los medios de comunicación, pues en Ciencia “hablar por hablar sin haber estudiado y pensado primero” no sólo es inútil, sino contraproducente. Por otra parte, no es una buena práctica buscar “atajos” y esperar que otros nos resuelvan la “vida”. Esto no prepara para la pretendida autosuficiencia de los estudiantes universitarios que se desprende de las directrices del EEES. Igualmente, se recuerda que cada foro tiene una utilidad diferente y conviene ceñirse a ella para evitar que determinadas consultas se “pierdan” por mal direccionamiento, o



que determinadas intervenciones procedentes en un contexto se vean en otro completamente inadecuado.

Horas estimadas de trabajo del Estudiante (5 ECTS): 125

Horas de Teoría: $80 + 10^* = 90$

Horas de Prácticas: 10

Horas para PEC: 14

Horas actividades varias: 9

Horas para Examen : 2

TUTORIZACIÓN INTERCAMPUS

En todo este proceso, que se enmarca dentro del EEES, una pieza clave es la actividad docente de los profesores Tutores Intercampus, que son lo que establecerán un contacto personalizado con los estudiantes, tanto en la preparación de los contenidos teóricos y la resolución de ejercicios y problemas, como en la realización de las prácticas.

A este respecto, utilizando como referencia la situación tenida en el curso 2011-12, en esta asignatura habrá tres Tutores Intercampus radicados en los Centros Asociados de Madrid (grupo de tutoría 1), Barcelona-Terrassa (grupo de Tutoría 002), y Cádiz (grupo de tutoría 003). Cada uno de estos grupos de tutoría comprenderá una demarcación geográfica determinada que aparecerá señalada en el curso virtual (foros, etc.) y contendrá a los Centros Asociados convencionales correspondientes. Los Tutores Intercampus además impartirán una serie de tutorías virtuales que podrán seguirse en directo por Internet dentro del curso virtual y quedarán grabadas para poderse ver en cualquier otro momento.

Hay que indicar que el Equipo Docente propondrá al estudiante una prueba de evaluación continua (PEC) con dos partes, cuya corrección correrá, al igual que las Prácticas, a cargo del profesor Tutor Intercampus correspondiente. Como se indica más adelante las tareas de evaluación continua propuestas durante el curso no son obligatorias, pero están destinadas a mejorar el rendimiento de cada estudiante y pueden llegar a constituir un máximo del 30% de su calificación final, por lo que se recomienda encarecidamente que se realicen.

En resumen:

El método principal de aprendizaje será el estudio concienzudo de las Unidades Didácticas de la asignatura junto con el uso de la bibliografía adicional (tablas). Una serie de instrucciones secuenciales pertinentes para acometer esta tarea se le suministran al estudiante en la segunda parte de la Guía de Estudio. Las tutorías Intercampus serán una gran herramienta para que los estudiantes consigan un aprendizaje eficaz. Como complemento no obligatorio, pero muy útil, y para satisfacer los requisitos de la evaluación continua (EEES), está la realización de las actividades de evaluación continua, la PEC y las Prácticas EXCEL, que el estudiante podrá realizar en su propio domicilio y que repercutirán de forma importante en la calificación final. Por otra parte, las consultas con el Equipo Docente están siempre abiertas: vía teléfono en determinados horarios, correo postal, correo electrónico, foro de consultas generales, etc., con lo que se espera contribuir a la optimización del aprendizaje de esta disciplina.

8.EVALUACIÓN

En la evaluación continua del rendimiento del estudiante intervendrán los siguientes tres elementos:



- PEC. Prueba de Evaluación Continua (en dos partes PEC-1 y PEC-2) que contendrá ejercicios y problemas representativos de la materia correspondiente estudiada y será propuesta por el Equipo Docente. No es obligatoria, y se podrá realizar sólo una de las dos partes, pero esto causará la correspondiente disminución en la calificación que se obtenga (ver más adelante). Su ponderación para la calificación final será en total de un 20% (2 partes iguales -10%- una por cada parte de la PEC) y se calificará por el Tutor Intercampus correspondiente.
- PC. Prácticas EXCEL con computador a realizar en el propio domicilio. Como en el caso anterior no son obligatorias y su ponderación total para la calificación final será del 10%. De nuevo, si no se realizaran se perdería el 10% de la calificación correspondiente (ver más adelante). Las fechas para su realización se comunicarán oportunamente. Su evaluación correrá a cargo del Tutor Intercampus correspondiente.
- EP. Examen Presencial en el Centro Asociado al que esté adscrito o acuda el/la estudiante en las fechas que se publiquen por la UNED con antelación. Es de carácter obligatorio y tendrá una duración máxima de 2 horas. Si no se realiza, no se podrá superar la asignatura. Su ponderación para la calificación final será del 70% y su evaluación correrá a cargo del Equipo Docente de la Sede Central. Constará de 4 problemas a desarrollar, todos con el mismo valor en cuanto a calificación y con respuestas razonadas dentro de un espacio prefijado, sobre los contenidos de la asignatura.

Dada la naturaleza de esta asignatura, no se pretende que los estudiantes memoricen las fórmulas matemáticas que la configuran, más bien que sepan cómo y en qué circunstancias deben de ser aplicadas. El examen es pues una prueba "con libros". Será pues necesario utilizar en la sesión de examen el material siguiente:

X0. Cualquier tipo de material escrito que cada estudiante considere procedente. Esto incluye las UDD (M1, pueden estar anotadas y acompañadas de la fe de erratas), o cualquier otro texto, apuntes, etc.

X2. Unas Tablas Matemáticas (pueden estar anotadas y las recomendadas M2 se citan en la bibliografía).

X3. La calculadora con las características mencionadas en Recursos de Apoyo (M3).

OBSERVACIONES:

- Se insiste en la necesidad de utilizar los recursos anteriores para poder realizar adecuadamente Prueba o Examen Presencial. Por tanto, el estudiante deberá familiarizarse con ellos al máximo para poder obtener un rendimiento correcto.
- Queda excluido, obviamente, el uso de ordenadores portátiles, microordenadores y otros dispositivos electrónicos (ipad's, ipod's, teléfonos, etc.) en la sesión de examen.
- No se permitirá el intercambio de material durante la sesión de examen presencial.
- Se recuerda ir a este examen provisto también de material de escritura (bolígrafos, lápices, etc.) y de baterías de repuesto para la calculadora.

El criterio general utilizado es compatible con la idea de evaluación continua y, además, consistente con la división de los cinco créditos totales en: 3,5 créditos de formación teórica (EP) más 1,5 de formación práctica, habiéndose englobado esta última en *PEC+PC*.

Para obtener la calificación final como combinación de las tres actividades generales anteriores, los indicadores y criterios específicos a aplicar en cada caso se desarrollan con detalle en la segunda parte de la Guía. Como indicación global la asignatura se superará alcanzando una calificación final CF mayor o igual que 4,9 / 10 y que se obtendrá como

$$CF = (PEC-1 \times 0,1) + (PEC-2 \times 0,1) + (PC \times 0,1) + (EP \times 0,7)$$

en donde cada actividad considerada se considera calificada sobre una nota máxima de 10 (en el caso PC será la media aritmética de las prácticas propuestas). Si el examen no se realiza, no ha lugar la aplicación del promedio anterior.

Nótese que la única actividad necesaria para poder superar la asignatura es el examen. Cualquiera de las actividades, PEC1, PEC2, y PC, no realizada contribuirá con una calificación 0 (cero) al promedio anterior.



9. BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Comentarios y anexos:

El material básico para preparar la asignatura y para realizar la Prueba Personal (examen presencial) se indica a continuación. Consta de:

M1- Las Unidades Didácticas (UDD).

L. M. Sesé, *Cálculo Numérico y Estadística Aplicada*, Unidades Didácticas, UNED, 2011.

Contiene el desarrollo completo de los contenidos de la asignatura (teoría + ejercicios y problemas completamente resueltos). ISBN(13): 978-84-362-6168-4.

Este texto estará disponible también en versión electrónica (pdf) e incorporará las correcciones señaladas en la fe de erratas de la edición impresa.

M2- El libro de tablas matemáticas

M. R. Spiegel, J. Liu y L. Abellanas, *Fórmulas y Tablas de Matemática Aplicada*, McGraw-Hill, 2ª Edición Revisada (Serie Schaum), Madrid 2005. ISBN(13): 978-84-481-9840-4.

M2 es una excelente compilación de fórmulas y tablas que resultará necesaria para acometer el estudio de la asignatura, fundamentalmente en la parte estadística, y que puede también resultar muy útil para cuestiones matemáticas generales que se pueden presentar en el estudio (integraciones y derivaciones analíticas, etc.) por el ahorro de tiempo que puede representar su uso. En su defecto puede sustituirse por la versión inglesa:

M. R. Spiegel, J. Liu y L. Abellanas, *Mathematical Handbook of Formulas and Tables*, McGraw-Hill, 2ª Edición (Serie Schaum), Nueva York, 1999.

10. BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Comentarios y anexos:

Material escrito

1- F. Scheid, *Análisis Numérico*, McGraw-Hill (serie Schaum), 1972.

Un interesante texto de problemas sobre cálculo numérico que, aunque está dirigido a estudiantes de matemáticas, es de una gran utilidad para coger soltura en las aplicaciones de los Capítulos del Programa siguientes:

Cap. 1: (Caps. 1, 2, 3, 4, 6, 8, 21)

Cap. 2: (Cap. 21)

Cap. 3: (Caps. 3, 12, 13, 14, 15, 16)

Cap. 4: (Caps. 25, 26)

Cap. 9: (Caps. 19, 20, 24, 29)

Cap. 10: (Caps. 26, 30)

Hay una edición posterior de este texto (1988) en la que se han eliminado algunos temas como la integración de funciones oscilantes o algunas cuestiones teóricas sobre ecuaciones diferenciales. La correspondiente versión inglesa, por el mismo autor, es *Numerical Analysis*, 2nd. Ed. (1988), ISBN (13): 978-007-05-5221-0. Se mantienen los mismos capítulos numerados de consulta en este texto en inglés.

2- M.R. Spiegel, J. Schiller y R. Alu Srinivasan, *Probabilidad y Estadística*, 3ª Edición (Serie Schaum), McGraw-Hill, Madrid, 2010. ISBN(13): 978-607-15-0270-4.

Un texto ya clásico en el estudio de la estadística matemática en todas sus vertientes (teórica y aplicada). Contiene una gran cantidad de problemas completamente resueltos y las explicaciones son muy claras. De interés para coger soltura en la resolución de problemas y ejercicios de los Capítulos del Programa siguientes:

Cap.5: (Caps. 1, 2, 3, 4)



Cap 6: (Caps. 5, 6 , 7)
Cap.7: (Caps. 8, 10)
Cap. 10: (Cap. 9).

Recursos en la red

- a) http://www.sciam.com/explore_directory.cfm
Página de Scientific American donde poder encontrar información sobre aplicaciones y métodos de cálculo en Química.
- b) http://www.uned.es/cemav/15m_electron.htm
Página de acceso libre con el Proyecto "Quince Minutos en la Vida del Electrón: Una Mirada en Detalle". Se recorren los hechos que llevaron al descubrimiento del electrón y se presentan sus propiedades fundamentales a través de las contribuciones de los diferentes personajes científicos que hicieron posible este hito histórico que culminó con el descubrimiento de la Mecánica Cuántica. Se pone énfasis en la importancia del pensamiento matemático en toda esta aventura del conocimiento. Incluye Guía Didáctica, video, seis programas de radio y cinco entrevistas TV con científicos.

11.RECURSOS DE APOYO

Se recuerda aquí al estudiante que le será necesaria:

M3.- Una calculadora científico-técnica que contenga las funciones matemáticas habituales (trigonométricas, trascendentes, etc.). Se trata de una herramienta imprescindible tanto para el estudio como para la realización de la Prueba Presencial o Examen escrito convencional. Se permitirá en tal examen que esta calculadora posea capacidad de programación de pequeñas estructuras algebraicas y/o que contenga integradas aplicaciones estadísticas sencillas para resolver problemas (mínimos cuadrados, cálculos de medias y varianzas, etc.). No se permitirá el uso de calculadoras programables. A título informativo, modelos de calculadora estándar de este tipo para la asignatura son las CASIO fx: 350 ES, 991 ES Plus, 570 ES Plus. No se recomienda el uso de calculadoras con menores prestaciones.

También pueden resultarle de utilidad:

M4.- Diferentes tipos de papel gráfico: milimetrado, semilogarítmico y doble logarítmico.

M5.- El uso de Ordenador Personal. En particular Hoja de Cálculo EXCEL.

Con relación a PC-EXCEL, y para ayudar al estudiante a refrescar sus ideas sobre esta herramienta, en el curso virtual se encontrarán modelos de prácticas con sus correspondientes soluciones.

Otros materiales y recursos se indican en la segunda parte de la Guía de Estudio.

12.TUTORIZACIÓN

El elemento principal de tutorización se configura a través de los grupos de tutoría y tutorías Intercampus mencionados antes (Metodología). Se sustituyen así, en general, las tradicionales tutorías por estas nuevas formas de enseñanza a distancia. Todo ello sin perjuicio de que en algún caso un determinado Centro Asociado pueda tener su tutor presencial para esta asignatura, aunque esta será una circunstancia muy poco frecuente.

Tutorías Intercampus (ver Metodología): Los profesores Tutores Intercampus (3 en total) serán los encargados de la corrección de la PEC (en dos partes PEC-1, PEC-2) que será propuesta por el Equipo Docente. También se encargarán y de la propuesta, orientación y calificación de las Prácticas.

Las consultas al Equipo Docente de la Sede Central se dirigirán preferentemente al coordinador por cualquiera de los



siguientes medios

- Plataforma Alf (Foro de Consultas Generales al Equipo Docente).
- Correo electrónico –sólo situaciones de interés particular-.
- Por Correo Postal.
- Por teléfono.
- De forma personal durante la guardia o en entrevista concertada previamente.
- El Equipo Docente sólo estará disponible durante el periodo lectivo de esta asignatura.

ATENCIÓN DEL FORO CONSULTAS GENERALES EQUIPO DOCENTE:

Lunes y Jueves (en caso de ser festivos, serían los siguientes días lectivos, salvo causas de fuerza mayor). A discreción del Equipo Docente esta atención puede verse ampliada durante otros días lectivos de la semana.

HORARIO DE GUARDIA:

Lunes 16:00 h – 20.00 h

LUGAR:

Facultad de Ciencias de la UNED,

Paseo de la Senda del Rey 9,

28040 MADRID

Prof. Luis M. Sesé Sánchez -COORDINADOR-	Prof. Manuel Criado-Sancho
Despacho 321 Tfno: 91- 398 7387	Despacho 320 Tfno: 91- 398 7375

