

## **GUÍA DIDÁCTICA**

### ***CÁLCULO NUMÉRICO Y ESTADÍSTICA APLICADA***

#### **SEGUNDA PARTE (Guía de Estudio)**

2º CURSO DEL GRADO EN QUÍMICA

FACULTAD DE CIENCIAS

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS Y TÉCNICAS FISICOQUÍMICAS

UNIVERSIDAD NACIONAL DE EDUCACIÓN A DISTANCIA

#### ***Equipo Docente:***

**LUIS M. SESÉ SÁNCHEZ (COORDINADOR)  
MANUEL CRIADO-SANCHO**

## **0. EQUIPO DOCENTE**

### **Luis M. Sesé Sánchez**

Catedrático de Universidad en el Departamento de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas (Facultad de Ciencias) de la Universidad Nacional de Educación a Distancia.

Horario de Guardia: Lunes, 16:00 – 20:00 horas

Tfno: 91 - 398 7387

Facultad de Ciencias, despacho 321

### **Manuel Criado-Sancho**

Profesor Titular de Universidad en el Departamento de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas (Facultad de Ciencias) de la Universidad Nacional de Educación a Distancia.

Horario de Guardia: Lunes, 16:00 – 20:00 horas

Tfno: 91 - 398 7375

Facultad de Ciencias, despacho 320

(\*) Para canalizar adecuadamente las posibles consultas dirigirse al Coordinador de la asignatura.

## 1. PLAN DE TRABAJO

En este apartado se hace una exposición detallada del Plan de Trabajo sugerido al estudiante para un mejor aprovechamiento del tiempo. El balance global es el siguiente:

<b>Horas de Teoría:</b>	<b>80 + 10* = 90</b>
<b>Horas de Prácticas*:</b>	<b>10</b>
<b>Horas para PECs:</b>	<b>14</b>
<b>Horas Actividades varias:</b>	<b>9</b>
<b>Horas para Examen :</b>	<b>2</b>
<b>Horas de Trabajo (totales):</b>	<b>125</b>

lo que resulta en el total de 125 horas asignadas (5 créditos ECTS: 3,5 teóricos + 1,5 prácticos). Debajo se desarrolla un Plan de Trabajo “medio” y extendido a una duración estándar para el primer periodo del curso estimada en 13 semanas. Este número representa una adaptación de la duración máxima del teórico “semestre” (24 semanas) a la situación actual real de un cuatrimestre (máximo de 16 semanas).

En cuanto al trabajo personal del estudiante no se aprecian problemas serios para seguir el plan de trabajo. El único punto puede estar en el corte del período vacacional navideño, que aunque no es lectivo desde el punto de vista de la atención por parte de los docentes, debería el estudiante considerarlo como utilizable para el estudio personal extendido, como ha venido siendo habitual en los estudios universitarios. **Una cuestión adicional** es la ausencia de tutorías presenciales en la gran mayoría de los Centros Asociados, problema que se palia con la nueva figura del Tutor Intercampus (tres para esta asignatura) que atenderá su demarcación geográfica asignada (comprendiendo una serie de Centros Asociados convencionales) haciendo uso de herramientas virtuales con la plataforma ALF en varias formas.

### Tutorías Intercampus

**Habrán tres tutores Intercampus para esta asignatura, cada uno con su grupo de tutoría específico: Barcelona, Cádiz y Madrid. Cada uno de estos grupos estará formado por los estudiantes que pertenezcan a determinadas regiones geográficas (nacionales y extranjeras). Estarán reflejados una vez completado el proceso de matriculación en el curso virtual contenido en la plataforma ALF (foros específicos, etc.), de manera que cada estudiante sabrá así quién será su profesor Tutor durante el curso. Cada Profesor Tutor impartirá tutorías virtuales que podrán seguirse en directo por los estudiantes dentro del curso virtual y que quedarán grabadas para poder ser vistas con posterioridad. También cada Profesor**

**Tutor será responsable de calificar la Prueba de Evaluación Continua y de proponer y calificar las Prácticas de los estudiantes de su grupo de tutoría.**

(\*) Es importante notar que tanto las **dos partes de la PEC como las Prácticas PC son actividades de la evaluación continua** a la que podrá acogerse cada estudiante, y realizar en su domicilio durante los periodos dentro del calendario lectivo, **que se indicarán oportunamente en su momento**. El tiempo a dedicar a la realización de cada parte de la PEC se estima en 7 horas (en total 14 horas). El tiempo dedicado a las Prácticas (PC) se estima, en media y como dato de orientación, de una dedicación de 10 horas, repartidas entre unas tres sesiones, con un tiempo incluido de 2 horas para la redacción del informe final correspondiente, más 1 hora para las posibles explicaciones de corrección. Este tiempo es en total de 10 h, pero hay que señalar que una gran parte de la preparación teórica necesaria ya está incluida dentro de las 88 (90-2) horas de estudio personal del texto base de la asignatura y la realización de la Prueba de Evaluación Continua (PEC), pues la mayoría de las prácticas versarán sobre la resolución de problemas típicos de la asignatura. Esto da un balance para el tiempo efectivo dedicado a la formación práctica (PEC+Prácticas) que satisface las expectativas esperadas de las 37,5 horas (1,5 ECTS) y con la ventaja añadida de que tanto estas Actividades como el estudio de la materia se ven beneficiadas simultáneamente por la intersección de contenidos que presentan. El conjunto de todas estas actividades PEC+Prácticas contribuirán con el 30% a la calificación final.

**La no realización de alguna de estas actividades (PEC y PC) significaría la pérdida del porcentaje correspondiente en la calificación final. Por ejemplo, sobre un máximo de 10: a) si solamente no se realizara una de las dos partes de la PEC, pero sí se realizaran la otra parte de la PEC y las Prácticas, la máxima calificación alcanzable sería de 9; b) si no se realizaran las Prácticas, y sí se realizaran las dos partes de la PEC, la máxima calificación alcanzable sería de 9; c) si no se realizara ninguna, la máxima calificación alcanzable la aportaría el examen y sería de 7; etc.**

Por otra parte, se insiste en que el esquema mostrado en esta Guía es *lo recomendado en media*, de manera que cada estudiante puede alterar los tiempos/actividades/etc. indicados dependiendo de sus capacidades y circunstancias. Esta es la razón de que se haya dejado intencionadamente en blanco la primera columna "Audio, Videoclases ....". En principio y en las circunstancias en las que se desarrollará esta asignatura, la realización de las Prácticas no se contempla que sea en equipo, al carecer de la infraestructura básica tradicional de los Centros Asociados.

## 1.1. CRONOGRAMA GLOBAL

<b>ESTUDIO DE CAPÍTULOS + ACTIVIDADES</b>	<b>Audio o videoclases Materiales de Estudio</b>	<b>Seminario Presencial/ en línea</b>	<b>Curso virtual / Foro</b>	<b>Evaluación / Corrección</b>	<b>Sub-Total</b>	<b>Trabajo en equipo</b>	<b>Trabajo individual</b>	<b>Sub-Total</b>	<b>HORAS TOTALES</b>
Capítulo 1		1	0,5		1,5		5	5	6,5
Capítulo 2		1	0,5		1,5		6	6	7,5
Capítulo 3		1	0,5		1,5		10	10	11,5
Capítulo 4		1	0,5		1,5		7	7	8,5
Capítulo 5		1	0,5		1,5		10	10	11,5
REPASO LECTURAS ETC.		1			1		4	4	5
PEC (1ª parte) (Opcional)		(1)	----->	1	1		6	6	7
Capítulo 6		1	0,5		1,5		8	8	9,5
Capítulo 7		1	0,5		1,5		7	7	8,5
Capítulo 8		1	0,5		1,5		5	5	6,5
Capítulo 9		1	0,5		1,5		8	8	9,5
Capítulo 10		1	0,5		1,5		8	8	9,5
REPASO LECTURAS ETC.		1			1		4	4	5
PEC (2ª parte) (Opcional)		(1)	----->	1	1		6	6	7
*PRÁCTICAS (PC) C.A. (Opcionales)				1	1	--	9	9	10
Examen Presencial							2	2	2
<b>Total</b>		<b>12</b>	<b>5</b>	<b>3</b>	<b>20</b>		<b>105</b>	<b>105</b>	<b>125</b>

\* Se comunicará oportunamente el momento de su realización.

***Para información detallada véase Cronograma  
por Capítulos / Actividades al final de esta  
Guía.***

## 2. ORIENTACIONES PARA EL ESTUDIO

### 2.1 Introducción a los bloques temáticos

Los cuatro Capítulos (1-4) de la primera parte se dedican a cuestiones del Cálculo Numérico a un nivel teórico y práctico elemental. Del mismo modo los tres primeros capítulos de la segunda parte (5-7) se concentran en los conceptos y cuestiones básicas sobre las variables aleatorias y la descripción estadística de datos. La tercera parte consta sólo de un Capítulo (8) en el que se revisan las manipulaciones necesarias para realizar un seguimiento correcto de la propagación de los errores experimentales en la determinación de magnitudes derivadas (no medidas directamente). Los dos Capítulos de la cuarta y última parte (9 y 10) se ocupan de completar toda la materia presentada hasta aquí con la introducción de técnicas más avanzadas. Así, en el Capítulo 9 se presta atención a técnicas especiales de cálculo y de simulación numérica, en tanto que en el Capítulo 10 se consideran aspectos estadísticos complejos como son la simulación estadística y la validación de métodos aplicando nuevas técnicas al tratamiento de datos experimentales.

### 2.2 Resultados/Objetivos Generales del aprendizaje

- ✓ Apreciar el valor formativo de las herramientas matemáticas estudiadas.
- ✓ *El objetivo principal **no es la memorización de fórmulas**, sino el saber cómo y en qué circunstancias aplicarlas. Por ello se permitirá la consulta de material escrito en la Prueba Personal o Examen Presencial (se detalla más adelante).*
- ✓ 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 fisico-químicas y que está limitada a problemas ideales altamente sencillos.



- ✓ 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 una teoría probabilista.

Por lo que respecta al **Cálculo Numérico** el estudiante deberá alcanzar los siguientes resultados particulares *utilizando las técnicas y métodos que se detallan en los Capítulos 1-4 y 9*:

- ✓ Conocer y saber aplicar diferentes métodos numéricos elementales para resolver problemas de:  
Ajuste de funciones  
Manipulación de estas aproximaciones obteniendo respuestas significativas a operaciones complicadas del cálculo matemático, como son las  
interpolaciones,  
extrapolaciones,  
derivadas,  
integrales definidas.
- ✓ Conocer y saber aplicar diferentes métodos numéricos para resolver problemas de naturaleza no lineal como son  
ecuaciones,  
sistemas,  
diagonalizaciones,  
optimizaciones, etc.,  
y “simular” numéricamente procesos deterministas, como son las ecuaciones diferenciales ordinarias.
- ✓ Adquirir soltura en el manejo de Tablas Matemáticas para obtener respuestas a operaciones como son las integraciones y derivaciones analíticas. Una vez conocidos los fundamentos de estas operaciones



(Matemáticas I y II), este uso puede permitir al estudiante ahorrar un tiempo precioso para el estudio de otros conceptos.

Igualmente, por lo que respecta a la **Estadística Aplicada**, el estudiante deberá alcanzar los siguientes resultados particulares *utilizando las técnicas y métodos que se detallan en los Capítulos 5-7 y 10*:

- ✓ Conocer el lenguaje básico de la Estadística y saber aplicar sus conceptos básicos a la caracterización de poblaciones y muestras
  - Media
  - Varianza
  - Rango
  - Cuartiles, deciles, percentiles
  - Funciones de distribución de probabilidades, etc.
  - Muestreo
  - Estimadores Estadísticos, etc.
  - Adquirir soltura en el manejo de tablas estadísticas (Gaussiana, t de Student, Chi-cuadrado, F de Fisher).
- ✓ Formular y verificar hipótesis estadísticas observando los dos tipos de errores que pueden cometerse (tipo I y tipo II).
- ✓ Saber describir conjuntos de resultados experimentales mediante el conocimiento y aplicación de los correspondientes análisis de
  - Regresión (lineal y no lineal)
  - Varianza.
- ✓ Conocer y saber aplicar técnicas de simulación y validación como son las de
  - Monte Carlo
  - Estadística no paramétrica
  - Máxima verosimilitud
  - ANOVA

Por lo que respecta a la **Propagación de errores experimentales**, el estudiante deberá alcanzar los siguientes resultados *utilizando las técnicas y métodos que se detallan en el Capítulo 8*:

- ✓ Conocer las ideas principales sobre los diferentes tipos de errores que inevitablemente afectan a los procesos de medida experimental

Escala del aparato

Sistemáticos

Accidentales

Saber cómo distinguirlos, 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 se familiarizará con el uso de medios electrónicos de cálculo (calculadora de mano / sobremesa, PC) para resolver problemas.

***Se hace hincapié en que el uso eficiente de la calculadora científica (ver más adelante 2.4) le resultará vital para la realización del Examen Presencial. Las calculadoras traen un sencillo manual de manejo, de modo que la responsabilidad del aprendizaje de tal manejo recae sobre cada estudiante en particular. La misma directriz se aplica al conocimiento y manejo de la hoja de cálculo EXCEL, una herramienta muy difundida y de uso extendido ya en la enseñanza secundaria. Esta última herramienta será necesaria para la realización (opcional) de las Prácticas de tratamiento de datos con computación.***

***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 soluciones.***

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), con una orientación hacia la interpretación de resultados de interés para la Química.
- También deberá entrenarse en la confección de informes claros y suficientemente concisos, y de utilizar la tecnología informática para realizar cálculos, buscar datos, referencias bibliográficas y demás

### 2.3 Contextualización y orientaciones concretas para el estudio (capítulo por capítulo)

- ✓ No se concibe hoy día un buen profesional de la Química que no domine los rudimentos de los tratamientos numéricos aproximados ni los del análisis estadístico de datos, tanto si el profesional se dedica al trabajo del laboratorio experimental como al trabajo del laboratorio teórico-computacional, en ambos casos pudiendo pertenecer su actividad bien al mundo empresarial/comercial bien al mundo académico/investigador.
- ✓ Los controles de calidad, los estudios de diseño de fármacos, las investigaciones en materia condensada a bajas o altas temperaturas para el diseño de nuevos materiales, y otras muchas actividades que ayudan a mantener “en forma” nuestra sociedad, utilizan regularmente técnicas cuyos fundamentos y manipulaciones básicas se estudian en esta asignatura. Consecuentemente, el estudio de esta asignatura beneficiará al de otras disciplinas y asignaturas del Grado, tanto teóricas como experimentales, por la gran flexibilidad y aplicabilidad que los presentes temas tienen en todas ellas de una u otra forma.
- ✓ Es pues muy importante que el estudiante se familiarice con los conceptos y técnicas siguientes al punto de saber interpretarlos y aplicarlos en casos concretos. *El objetivo principal no es la memorización de fórmulas, sino el saber cómo y dónde/cuándo aplicarlas.* Consecuentemente en el examen presencial se permitirá el material autorizado ya reseñado para consultar todos estos detalles.

Las principales influencias entre capítulos se resumen a continuación:

- 1 → 2, 3, 7, 9
- 2 → 3, 7, 9
- 3 → 9, 10
- 4 → 7, 9, 10
- 5 → 6, 7, 8, 10
- 6 → 7, 8, 10
- 7 → 1, 10

**En el texto de la asignatura se suministra al inicio de cada Capítulo un cuadro de conceptos y de las relaciones con otros Capítulos del programa.**

## 2.4 Materiales requeridos para el estudio

El material básico para preparar la asignatura y **necesario** para realizar la Prueba Personal (Examen Presencial) se indica a continuación. Consta de:

- ✓ **M1-** Texto de la asignatura (las Unidades Didácticas)

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

Está disponible ya como **libro electrónico (2013)**. Contiene el desarrollo completo de los contenidos de la asignatura (teoría + ejercicios y problemas completamente resueltos). Este texto electrónico incluye una serie de mejoras sobre la edición impresa (erratas corregidas y adiciones).

**Existe una fe de erratas advertidas (más adiciones finales) que se encontrará disponible en el curso virtual. También en:**

[http://portal.uned.es/portal/page?\\_pageid=93,25156889&\\_dad=portal&\\_schema=PORTAL](http://portal.uned.es/portal/page?_pageid=93,25156889&_dad=portal&_schema=PORTAL)

- ✓ **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.

Una excelente compilación de fórmulas y tablas, con correcciones a la primera edición, 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.

Cualquier otra opción de libro de tablas puede resultar válida, pero por su amplitud y características, se recomienda el uso de la citada.

**M3.- Una calculadora científica. Se trata de una herramienta imprescindible y por razones de homogeneidad e igualdad de oportunidades no se permitirá el uso de calculadoras programables de un nivel mayor que el de los modelos típicos de las calculadoras científico- técnicas (recomendadas) CASIO fx: 350 ES, 991 ES Plus, 570 ES Plus.**

Este tipo de calculadora permite tratar problemas programando sencillas fórmulas y trae incorporadas varias rutinas de tratamiento estadístico de datos. En otro caso, con calculadoras de menos nivel no debe olvidarse que deben tener funciones trascendentes, etc. Por las características de la asignatura esta última opción de calculadora, mucho menos potente que las indicadas arriba, es poco recomendable.

## 2.5 Orientaciones concretas para el estudio

En 2.8 se detallan las estrategias (pautas) generales a seguir para el estudio de todos y cada uno de los capítulos de esta asignatura. Aquí se dan las descripciones de los contenidos concretos de todos ellos, que son los verdaderos objetivos particulares a dominar, junto con algunos consejos generales sobre sus posibles dificultades y cómo afrontarlas.

## I. MÉTODOS NUMÉRICOS

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

#### 1.1 Introducción.

##### A. Polinomios de colocación

1.2 Ajustes con polinomios de colocación: opciones de ajuste polinómico, el criterio de colocación, observaciones de interés.

1.3 La tabla de diferencias y los polinomios de Newton: el polinomio de avance de Newton, el polinomio de retroceso de Newton, observaciones prácticas.

1.4 El polinomio de Lagrange.

1.5 Otras técnicas.

#### *B. Mínimos cuadrados*

1.6 Concepto y aplicación al caso lineal: estudio del caso lineal, unicidad de la solución, el carácter de mínimo, la bondad del ajuste, la utilidad extendida del caso lineal, nota adicional sobre el error.

1.7 Ajustes de mínimos cuadrados de orden superior: el caso cuadrático, el caso general, observaciones prácticas.

### Orientaciones sobre los contenidos

El **Capítulo 1** se dedica a una introducción de la aproximación de funciones reales de variable real. Se considera primero el problema de aproximar mediante **polinomios de colocación** funciones definidas no mediante una expresión analítica sino mediante una tabla numérica  $(x_i, y_i)$ , normalmente asociada a un conjunto de resultados experimentales, y se trata el problema general del error cometido. Con ello las operaciones matemáticas a realizar quedan reducidas a las meramente aritméticas (suma, resta, multiplicación y división), lo que redonda en la facilidad de cálculo (manual y con máquina). Por otra parte, el uso de polinomios se ve beneficiado por el hecho de que las diferenciaciones e integraciones son inmediatas y producen polinomios. Además sus raíces son fácilmente calculables y una alteración del origen de coordenadas no altera su forma global, ya que sólo cambian sus coeficientes. Se introduce el concepto de **tabla de diferencias**, muy útil también en el análisis de datos (búsqueda de errores), y se aplica a la obtención de dos tipos de polinomios de colocación clásicos para datos de entrada igualmente espaciados: **avance y retroceso de Newton**. Seguidamente, se estudia el **polinomio de Lagrange**, cuya utilidad es máxima para datos no igualmente espaciados. Se continúa con la presentación del problema general de la aproximación de **mínimos cuadrados** en la base polinómica convencional, como una alternativa con propiedades de suavidad a los ajustes polinómicos anteriores. Es este un Capítulo a medio camino entre el Cálculo y la Estadística ya que sus



aplicaciones van en los dos sentidos y las cuestiones tratadas aquí se completarán después con los estudios estadísticos de la regresión.

## 2. Ajuste de funciones con polinomios ortogonales

2.1 Introducción.

2.2 El caso discreto: Polinomios de Gram-Tschebyscheff. El sistema normal de ecuaciones, forma de los polinomios.

2.3 El caso continuo: Producto escalar y distancia entre funciones. Producto escalar de funciones, criterios de aproximación entre funciones, desarrollos en serie de una base completa, el cálculo de los coeficientes del desarrollo, observaciones de interés.

2.4 Caso continuo: Polinomios de Legendre. Ortogonalización constructiva de Gram-Schmidt, forma de los polinomios normalizados de Legendre, propiedades adicionales.

2.5 Caso continuo: Polinomios de Tschebyscheff. Definición, propiedades adicionales, la economización de polinomios, observaciones de interés.

2.6 Caso continuo: Polinomios de Hermite y de Laguerre.

### Orientaciones sobre los contenidos

En el **Capítulo 2** se profundiza en el asunto de los mínimos cuadrados desde la perspectiva numérica. Siguen considerándose las funciones reales de una variable real continuas en un intervalo, por sus potenciales aplicaciones en los ajustes de datos experimentales y en los desarrollos en conjuntos ortonormales tan comunes en las aplicaciones de la Mecánica Cuántica. La deducción del **sistema normal** de ecuaciones en un caso de orden arbitrario, con datos sin errores de entrada, lleva a la consideración de los **problemas asociados** con este planteamiento directo (orden de la aproximación y eficiencia en los cálculos, inestabilidad) y a la solución vía **polinomios ortogonales**. Se abordan los casos discretos con los polinomios de **Gram-Tschebyscheff** y también **las sumas trigonométricas** (funciones periódicas definidas por tablas). Por su interés general se trata el caso continuo introduciendo los conceptos básicos de **función de peso**, **producto escalar** y **distancia** entre funciones, incidiendo así en las propiedades de los polinomios de **Legendre** y de los **polinomios de Tschebyscheff** (propiedades de “error igual”) como *bases de desarrollo* de funciones “arbitrarias”.



Este es un Capítulo más complejo que el anterior, pero igualmente necesario y de aplicación imprescindible cuando se desea obtener el “mejor” ajuste a una serie de datos o la “mejor” aproximación a una función complicada. Se recomienda encarecidamente un repaso de los conocimientos que deberían haberse adquirido en Matemáticas II sobre las series de Fourier, algo que también va a ser muy útil más adelante para las aproximaciones trigonométricas discretas que se estudian en el **Capítulo 9**. Dado que se trata de un conocimiento previo, las series de Fourier pueden formar parte del examen Presencial, no como objetivo en sí mismas, sino como elemento de comparación en problemas de desarrollos de funciones en bases ortogonales.

### 3. Aplicaciones numéricas básicas

3.1 Los errores en el cálculo numérico: Errores absoluto y relativo, error de redondeo y conceptos asociados, errores de entrada y cifras significativas fisicoquímicas, consideraciones adicionales (errores de algoritmo y otras).

3.2 Interpolación y extrapolación: observaciones prácticas, elección de grado, selección de puntos de la tabla, tipo de polinomio, tabla desigualmente espaciada, notas complementarias, error de interpolación.

3.3 Propagación de los errores en los datos de entrada: alternancias de signo en una tabla de diferencias, errores de entrada.

3.4 Diferenciación numérica: fórmulas de Newton, fórmulas de Stirling, y extrapolación de Richardson.

3.5 Integración numérica: regla del trapecio, regla de Simpson, técnicas Gaussianas (Legendre, Hermite, Laguerre), tratamiento de integrales singulares y de integrales oscilantes.

#### Orientaciones sobre los contenidos

En el **Capítulo 3** se aplican los conceptos anteriores en la realización de las operaciones numéricas básicas con funciones definidas por tablas de datos: **interpolación, extrapolación, derivación, e integración**. Se presta atención al problema de la importancia de los posibles **errores** (de entrada, algoritmo y redondeo) en la obtención de resultados numéricos, y se enfatiza el diferente

comportamiento de interpolación y extrapolación en este aspecto. La interpolación es una operación razonablemente segura, en tanto que la extrapolación es casi siempre una operación nada recomendable. Se estudian diversas técnicas numéricas de derivación (**Stirling, Richardson**) y de integración y se analizan las evaluaciones del error que se comete con estas estimaciones. Entre las de integración se presentan técnicas tanto para tratar **casos discretos** como **casos continuos** de funciones que o no pueden integrarse analíticamente, o pudiendo serlo resultan muy complicadas. Así se tratan las técnicas de: **trapezios, Simpson** y **Gauss-Legendre** para trabajar con intervalos finitos, las de **Gauss-Laguerre** y **Gauss-Hermite** para trabajar con **intervalos infinitos, integrales con singularidades** o **factores oscilantes** en el integrando. Como Complementos el texto base (UDD) contiene unas tablas para la integración Gaussiana en los casos indicados.

## 4. Resolución de ecuaciones y sistemas

4.1 Conceptos preliminares: raíces (ceros) de ecuaciones no lineales, sistemas de ecuaciones y diagonalización.

### A. Ecuaciones no lineales

4.2 Separación de raíces reales y estimación del error.

4.3 Método de bisección.

4.4 Método de la falsa posición (*regula falsi*).

4.5 Método de Newton-Raphson: definición del algoritmo, condiciones suficientes de convergencia, estimación del error, la variante Newton-secante.

4.6 Método iterativo de punto fijo.

4.7 El caso de las raíces múltiples: Métodos para determinar la multiplicidad.

### B. Sistemas de ecuaciones

4.8 Sistema lineal (no homogéneo): método de Gauss con pivote, estimación del error.

4.9 Sistema no lineal: método de Newton-Raphson, método del gradiente.

### Orientaciones sobre los contenidos

El **Capítulo 4** presenta los fundamentos de la resolución numérica de **ecuaciones no lineales** y los **sistemas de ecuaciones** (lineales no homogéneos, y no lineales). Estos son problemas que aparecen con frecuencia en conexión con

la determinación de orbitales moleculares (el ejemplo más típico de **diagonalización** que se considerará en detalle más adelante, en el **Capítulo 9**), pero también en otros contextos como son los de la minimización (u **optimización**) de funciones, la determinación del punto crítico (un sistema no lineal cuando se utiliza la ecuación de estado del virial, etc. Se analiza primero cómo **separar las raíces** en intervalos, para luego aplicar con garantías métodos iterativos que conduzcan a las correspondientes soluciones. Se estudia el cálculo de **raíces simples** aplicando los métodos de **bisección**, la **regula falsi**, **Newton** y de **iteración de punto fijo**. El siguiente asunto es el tratamiento de las **raíces múltiples** (asociadas con la degeneración en los problemas de diagonalización). Luego se pasa al estudio de los **sistemas de ecuaciones** considerando el caso de ecuaciones lineales (método de **Gauss con selección de pivotes** para controlar los errores numéricos) y el caso de ecuaciones no lineales en dos variables (métodos de **Newton** y del **gradiente**).

## II. INTRODUCCIÓN A LA TEORÍA Y APLICACIONES DE LA ESTADÍSTICA

### 5. Distribuciones de probabilidad

5.1 Probabilidad, Estadística y Química: concepto de probabilidad, breve presentación axiomática, otras observaciones y aplicaciones en la Química.

5.2 Variables aleatorias, población y muestra

5.3 Funciones de distribución de probabilidades: variables monodimensionales (discretas y continuas), variables monodimensionales derivadas,

5.4 Caracterización de una distribución de probabilidad: valor medio y desviación típica (estándar), momentos de una distribución, medidas de asimetría y de exceso, otros parámetros.

5.5 Ejemplos de distribuciones discretas: binomial, Poisson, multinomial.

5.6 Ejemplos de distribuciones continuas: uniforme, Gaussiana, logarítmico-normal.

5.7 Composición de variables aleatorias: valores medios y varianzas de funciones aleatorias, suma y producto de variables aleatorias, distribuciones de probabilidad en n dimensiones.

### Orientaciones sobre los contenidos

En el **Capítulo 5** comienza la parte estadística del Programa. La Química como tal está plagada de ejemplos, tanto experimentales como teóricos, en los que los razonamientos estadísticos que involucran variables aleatorias y distribuciones de probabilidad son indispensables para entender y formular los problemas, así como para llegar a soluciones aceptables de ellos. Para ilustrar todas estas interrelaciones se da primeramente una discusión en la que se presentan los conceptos básicos de probabilidad, del razonamiento estadístico, y de las aplicaciones en la Química de estas herramientas matemáticas. Se dan seguidamente las definiciones básicas de **variables aleatorias, población y muestra** y se pasa a discutir las **funciones de distribución** de probabilidades (**densidad e integral**) en los casos discreto y continuo para variables monodimensionales. Después se estudian los parámetros que permiten caracterizar una población (**valor medio, desviación típica, momentos**, etc.) y se continúa con el estudio de ejemplos discretos en una dimensión: la distribución **binomial** (útil para estudiar redes de espines  $\frac{1}{2}$ ); la distribución de **Poisson** (útil para estudiar fluctuaciones en volúmenes pequeños o la desintegración de sustancias radiactivas), y la distribución **multinomial** que generaliza la binomial. El punto siguiente es el de los ejemplos de distribuciones continuas en una dimensión: la distribución **uniforme** (sorteos al azar), la omnipresente distribución **Gaussiana** (ley de errores y de las velocidades moleculares en un gas –Maxwell-), resaltando su importancia general como ley límite y enunciando sin demostración el teorema central del límite. Por último se considera la **composición de variables** aleatorias y los valores medios y dispersiones de estas composiciones, concluyendo con una breve nota sobre las **distribuciones multidimensionales** en general y algunas herramientas de uso común (representación en “**cluster**”).

## **6. Muestreo, estimación y decisión estadística**

6.1 Muestreo de poblaciones: métodos generales de muestreo, observaciones adicionales.

6.2 Distribuciones muestrales: media y varianza, proporciones, sumas y diferencias, mediana.

6.3 Inferencia estadística (I): estimaciones por un punto y por intervalos de confianza.

6.4 Inferencia estadística (II): formulación y verificación de hipótesis estadísticas. Cinco pasos a dar en hipótesis estadísticas, observaciones adicionales, principios de admisión y de rechazo de hipótesis.

6.5 Función de potencia y curva OC.

6.6 Gráficos de control (Shewhart) y aleatoriedad.

6.7 Comparación de muestras: medias y proporciones.

6.8 Teoría de pequeñas muestras: distribución  $t$  de Student, distribución chi-cuadrado, distribución F de Fisher.

### Orientaciones sobre los contenidos

El **Capítulo 6** se ocupa de cuestiones estadísticas de corte práctico, como son el **muestreo** de poblaciones, la **estimación** de parámetros poblacionales y la formulación y validación de **hipótesis estadísticas**. Se comienza dando unas ideas generales de los tipos de muestreo (por atributos o por variables, al azar, estratificado, con y sin remplazamiento) y de las distribuciones muestrales (de medias, varianzas, de proporciones, de diferencias y sumas). Con ello se pretende adquirir información general sobre una población y se considerará, hasta el último epígrafe del Capítulo, que la muestra es suficientemente grande y puede tratarse mediante una distribución Gaussiana. El paso siguiente es la **Inferencia Estadística** que se divide en dos partes. La primera se dedica a las estimaciones de los parámetros de la población (verdaderos valores) a partir de los **estadísticos** de la muestra (aproximaciones estadísticas). Aparecen aquí los estadísticos sesgados e insesgados, eficientes (los de menor varianza) y no eficientes. Conceptos centrales son las estimaciones por **punto** y por **intervalos de confianza**. La segunda parte de la Inferencia considera el problema de la toma de decisiones a partir de los análisis anteriores efectuados sobre muestras extraídas de una población. Esto se hace formulando **hipótesis estadísticas** (que pueden ser o no ciertas) sobre las distribuciones de probabilidad de la población y tiene una amplia utilidad en la selección de procesos mejores que los existentes, cuestiones de buen funcionamiento de una operación, etc. Se tratan después los dos tipos de errores que pueden cometerse en este proceso, el **tipo I** (rechazar la hipótesis nula cuando es correcta) y el **tipo II** (aceptar la hipótesis alternativa cuando es errónea). Se presentan seguidamente algunas construcciones gráficas: la **función de**



**potencia**, la **curva característica de operación** (OC), y los **gráficos de control**. Estas construcciones son muy útiles pues muestran gráficamente detalles importantes del proceso o ayudan a detectar problemas de funcionamiento en éste. Se estudian los métodos de comparación de muestras y finalmente, se presta atención a la teoría de pequeñas muestras. En este contexto se analizan las diferentes utilidades de las distribuciones: **t de Student**, **chi-cuadrado** y **F de Fisher**.

## 7. Correlación, regresión y estadística no paramétrica

7.1 Experimentos con más de una variable aleatoria, correlación y regresión.

7.2 Ecuaciones empíricas típicas en dos variables y su reducción a forma lineal: tipos básicos con dos parámetros, tipos con tres y cuatro parámetros.

7.3 El coeficiente de correlación en dos variables: correlación de poblaciones, correlación lineal en muestras bivariantes, el coeficiente  $r$  como estimador estadístico.

7.4 Aspectos prácticos de la regresión lineal por mínimos cuadrados.

7.5 Desestimación de puntos en el análisis de datos: tests de cuartiles con extensión (box-and-whisker plot), test de distancias.

7.6 Correlación lineal múltiple.

7.7 Estadística no paramétrica: test de signos, correlación por rangos de Spearman.

### Orientaciones sobre los contenidos

El **Capítulo 7** trata con las cuestiones de **correlación**, **regresión** y **estadística no paramétrica**. Se consideran así los problemas de la cuantificación del grado de relación que presentan una variable dependiente y una (**correlación simple**) o varias variables independientes (**correlación múltiple**). Cuando una ecuación es satisfecha con exactitud por todas las variables implicadas se tiene, en este caso particular, una correlación perfecta. En el caso general la teoría estadística suministra métodos para optimizar expresiones matemáticas empíricas y obtener “la mejor” relación funcional (mínimos cuadrados) entre las variables, suministrando medidas (coeficientes) para estimar el grado (o grados) de correlación existente. Utilizando estas relaciones funcionales óptimas, que poseen propiedades más suaves que los datos originales, se puede estimar el valor de la variable dependiente para determinados valores de las variables independientes

(**regresión**). Se retoma así la discusión iniciada en el Capítulo 1 relativa a los mínimos cuadrados, pero ahora desde la perspectiva estadística. En el Capítulo presente se analizan las posibilidades de realizar ajustes de regresión de funciones complicadas (una variable independiente) reduciéndolas a **forma lineal** mediante los consiguientes **cambios de variable**. Se desarrolla con detalle este problema lineal determinando los coeficientes de la relación, los errores asociados, y el **coeficiente de correlación**. Aquí se presta especial atención al significado del coeficiente de correlación como ligado a una distribución Gaussiana bivalente y se considera la **transformación z de Fisher**, tratándose también algunos aspectos prácticos de la regresión lineal. Una vez considerados algunos tests sencillos (**cuartiles** y **Cook**) para identificar puntos extraños en una muestra que pueden desvirtuar el análisis de ésta, se pasa después al caso de la **correlación lineal múltiple** centrandó el problema en el caso de tres variables (plano de mínimos cuadrados) y analizando el cálculo de los diferentes coeficientes de correlación y los errores típicos de la estima que pueden definirse. Finalmente, por su interés como técnicas alternativas del análisis de la correlación, se estudian dos aplicaciones sencillas de la denominada **estadística no paramétrica** (test de los signos y correlación por rangos de Spearman).

### III. ANÁLISIS Y PROPAGACIÓN DE LOS ERRORES EXPERIMENTALES

#### 8. El tratamiento de errores en datos experimentales

- 8.1 Introducción.
- 8.2 Los errores en la medición experimental.
- 8.3 La propagación del error de escala del aparato.
- 8.4 Propagación de los errores sistemáticos.
- 8.5 Propagación de los errores accidentales.
- 8.6 Un caso de estudio: cálculo del error total de un índice de refracción.



### Orientaciones sobre los contenidos

El **Capítulo 8** se ocupa del estudio de la propagación de errores experimentales y de cómo evaluar el error total de una medición prestando atención a los aspectos estadísticos. La posición de este Capítulo en el Programa es ciertamente un asunto discutible. Por una parte, desde un punto de vista numérico el Capítulo del error en la evaluación de operaciones matemáticas ya se ha considerado anteriormente, y algunas cuestiones a considerar aquí podrían haberse incluido allí. Por otra parte, una buena porción del objeto de este capítulo ya se ha venido considerando en todos los Capítulos precedentes del bloque II, pues las inevitables características estadísticas asociadas con la medida experimental han ido apareciendo. Finalmente, el Libro Blanco de los Estudios de Grado dedica un apartado especial y diferenciado del resto a este asunto, con situación en este lugar. De ahí que, basando la elección en las dos últimas razones, se haya optado por situarlo aquí.

Se empieza distinguiendo entre las **mediciones directas** de una magnitud y las **indirectas** que resultan de aplicar relaciones matemáticas a la cantidad medida. La siguiente cuestión es la clasificación de errores, haciendo hincapié en las posibles fuentes de error desde el punto de vista experimental: **de escala** del aparato de medida, **sistemáticos** de un aparato o proceso de medida, y **accidentales** que son los derivados de la naturaleza aleatoria de las variables que se miden. Hay pues revisión de conceptos operativos ya encontrados. Los dos primeros tipos generalmente son constantes en el proceso, pero el tercero tiene una naturaleza **casual** que hace que las mediciones individuales oscilen alrededor de un determinado valor medio, y esto lleva directamente a la consideración de las características estadísticas que juegan un papel en el proceso de medida. Se continúa con la evaluación de **errores absolutos** y **varianzas** en los resultados de mediciones directas e indirectas (operaciones aritméticas, funciones de una y de varias variables), estudiando la propagación de cada tipo de error. Finalmente se considera con detalle el cálculo numérico del efecto global de los errores presentes en un proceso de medida hipotético (un índice de refracción) con una muestra finita: el error total se construye como una suma de todos los errores (¡los sistemáticos

tienen signo!), y se prestar atención especial a los **límites de confianza** con los que se expresa el error accidental con el que viene afectada la (media de la) medición. Para pequeñas muestras el uso de la **t de Student**, estudiada previamente, sirve perfectamente para el anterior propósito.

## IV. SIMULACIÓN Y VALIDACIÓN DE MÉTODOS

### 9. Métodos avanzados de cálculo y de simulación numérica

#### A. La aproximación trigonométrica

##### 9.1 Polinomios trigonométricos

#### B. Simulación numérica de procesos deterministas

##### 9.2 Ecuaciones diferenciales: generalidades

##### 9.3 Ecuaciones diferenciales ordinarias

##### 9.4 Ecuación diferencial de primer orden y primer grado (valor inicial): Método de Euler, estabilidad y error, predictor-corrector de Euler, métodos de Runge-Kutta.

##### 9.5 Ecuación diferencial de segundo orden (valores iniciales): Método de Runge-Kutta (IV), método del predictor –corrector de Adams

##### 9.6 Problemas de valores de frontera

#### C. Diagonalización numérica de matrices reales y simétricas

##### 9.7 Conceptos generales

##### 9.8 Método del polinomio característico: determinación de vectores propios.

##### 9.9 Método de Jacobi: la transformación ortogonal, la construcción de la matriz ortogonal O, observaciones prácticas

##### 9.10 Tests de diagonalización y técnicas complementarias

#### Orientaciones sobre los contenidos

En el **Capítulo 9** se van a tratar cuestiones más avanzadas relacionadas con la simulación de procesos. En primer lugar se comienza con la aproximación trigonométrica (o suma de Fourier) que está estrechamente relacionada con los desarrollos en conjuntos ortogonales del **Capítulo 2**, se continúa después con la resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias para simular procesos deterministas, y finalmente se pasa a la diagonalización de matrices reales y simétricas con lo que se completa la materia vista en el Capítulo 4.

En cuanto a las **aproximaciones trigonométricas** se considerará cómo representar funciones periódicas definidas mediante una tabla de datos mediante

desarrollos polinómicos finitos en la base trigonométrica compuesta por senos y cosenos (**sumas trigonométricas**). Todas estas aproximaciones trigonométricas son de especial interés en un buen número de aplicaciones (Mecánica Cuántica, el análisis de señales, cristalografía, etc).

Por lo que respecta a la resolución numérica de **ecuaciones diferenciales ordinarias** se tratarán los casos más sencillos, pero suficientemente importantes en las aplicaciones, de las ecuaciones de primer orden y primer grado y también las de segundo orden (problema de **valores iniciales**). Varias estrategias van a ser presentadas cubriéndose los esquemas convencionales (**Euler y Runge-Kutta**), así como los enfoques más precisos basados en algoritmos **predictor-corrector** (Euler y Adams). Aunque los algoritmos de Euler son poco adecuados para las aplicaciones se presentan por su alto valor pedagógico, ya que ilustran de manera sencilla las características generales de todos estos métodos. Como una ampliación directamente relacionada con las ecuaciones de segundo orden se estudia además la resolución numérica del caso de dos ecuaciones diferenciales de primer orden acopladas. También se presta algo de atención a las complicadas cuestiones **del error y la estabilidad** en este campo numérico y, para concluir, se analiza un sencillo ejemplo de problema de **valores en la frontera** con una ecuación diferencial lineal de segundo orden.

La tercera parte de este capítulo se concentra en la **diagonalización numérica** de matrices cuadradas reales y simétricas, empezando por el método más fácilmente visualizable considerando el problema asociado de valores propios que conduce al denominado **polinomio característico**. De las raíces (todas reales) de este polinomio se obtienen los **autovalores** (las energías en un cálculo de orbitales moleculares, por ejemplo) y con ellas, a través de la resolución del **sistema homogéneo** de ecuaciones lineales asociado, los **autovectores** (los orbitales moleculares propiamente dichos, en el ejemplo comentado). Esta es una técnica correcta pero muy poco eficiente a medida que el orden de la matriz a diagonalizar crece. Por ello, se explica también el fundamento del método de

diagonalización (iterativa) de **Jacobi**, que utiliza **matrices de rotación** parciales para eliminar (hacer cero) los elementos de la matriz simétrica original situados fuera de la diagonal principal. Finalmente se dan algunos “tests” útiles para detectar errores en la diagonalización.

## 10. Métodos estadísticos de simulación y validación

### A. Integración numérica multidimensional

10.1 Integración Monte Carlo: aspectos numéricos (familias multiplicativas congruentes), aspectos estadísticos (el error de integración).

### B. Aplicaciones de los procesos de minimización

10.2 Promedios con pesos muestrales.

10.3 Ajuste lineal chi-cuadrado de datos: aspectos numéricos, aspectos estadísticos, observaciones adicionales.

10.4 Ajuste de datos a distribuciones de probabilidad: caso continuo (ajuste Gaussiano), caso discreto (ajuste binomial)

10.5 Estadística robusta: ajuste de una línea recta.

### C. Análisis de la varianza

10.6 Homogeneidad de un conjunto de varianzas muestrales.

10.7 Homogeneidad de un conjunto de medias (ANOVA-1): estimación entre muestras, estimación dentro de la muestra, observaciones adicionales.

10.8 Análisis de la varianza con dos factores de variación independientes (ANOVA-2): caso de dos efectos fijos, caso de dos efectos aleatorios.

10.9 Análisis de la varianza en ajustes de regresión.

### Orientaciones sobre los contenidos

Por último, el **Capítulo 10** está dedicado a operaciones más complejas y que, convenientemente diseñadas, pueden ser objeto de la realización de Prácticas con paquetes informáticos bajo la supervisión del profesor Tutor. Esto no significa que su aplicación no pueda ser objeto de la prueba de examen, algo que puede suceder con cálculos sencillos.

Para empezar, por completitud con las operaciones de integración numérica se considera la **integración numérica Monte Carlo**, que tratar eficientemente funciones multidimensionales utilizando **números “aleatorios”**, y se presta atención a la generación de éstos con diversos algoritmos.

Se continúa con algunas aplicaciones importantes de los **procesos de minimización** (basados en las técnicas de máxima verosimilitud): los **promedios**

con pesos muestrales, el ajuste chi-cuadrado de datos afectados de errores de entrada (una generalización natural de los mínimos cuadrados vistos en el Capítulo anterior), y los ajustes de datos a distribuciones teóricas discretas y continuas.

Estas aplicaciones permiten apreciar el porqué de determinadas elecciones que se han efectuado en otros lugares de la parte estadística del Programa (magnitudes muestrales como valores medios, varianzas, etc). Esta segunda parte se concluye con una discusión simple de la **estadística robusta**, analizándose el caso del ajuste lineal a una serie de datos.

La tercera y última parte se dedica a un tema de gran interés en el tratamiento de datos y que está basado en el uso de la distribución de Fisher: el **análisis de la varianza**. Primero se considera el problema previo de la **homogeneidad de un conjunto de varianzas** muestrales, para estudiar después aplicaciones simples del análisis de la varianza: la identificación de la **homogeneidad de un conjunto de medias** muestrales y el análisis de la **influencia de dos factores** en series de datos (factores de efecto fijo y factores de efecto no controlables). Para finalizar se trata brevemente la aplicación del análisis de varianza a la selección del **ajuste más significativo** (lineal *versus* cuadrático) en un cálculo de regresión.

COMO CONSEJO GENERAL: Proceder secuencialmente, epígrafe por epígrafe. Ver las pautas recomendadas en **2.8 (3 y 4)**. Al realizar los ejercicios y problemas sígase un método de trabajo ordenado, tal como se muestra *detalladamente* en el texto para no cometer errores de procedimiento. Este va a ser un entrenamiento vital a la hora de enfrentarse a la Prueba o Examen Presencial (**3.4**).

## V. TRATAMIENTO DE DATOS EXPERIMENTALES MEDIANTE COMPUTACIÓN

### 11. Prácticas

A continuación se dan unas ideas generales sobre el formato y contenido de las Prácticas a realizar por los estudiantes (**en sus domicilios**), bajo supervisión



del profesorado Tutor Intercampus, utilizando las prestaciones básicas que ofrecen los paquetes o programas informáticos 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. Por razones de uniformidad y de amplia difusión en los ordenadores personales el paquete u hoja de cálculo a utilizar será la hoja **EXCEL**. Esta es una hoja cuyo uso está muy extendido, incluso en los estudios de la enseñanza secundaria, y se recomienda refrescar la familiaridad con su utilización. **Se recomienda consultar los “tutoriales” integrados que acompañan a ésta herramienta. Para ayudar al estudiante en esta tarea el curso virtual contendrá modelos de Prácticas con sus soluciones EXCEL correspondientes.**

Las Prácticas a realizar por los estudiantes con las orientaciones concretas (guiones, etc.), **se comunicarán oportunamente, así como lo será el periodo concreto de su realización**. Los datos necesarios para realizar los análisis pedidos más abajo podrían ser del tipo detallado bien en los Problemas Numéricos de aplicación que acompañan a los Capítulos del texto base (UUDD), o bien otros que se puedan estimar más oportunos.

El conjunto de las prácticas se deberá entregar al Tutor Intercampus correspondiente, a través de la plataforma ALF, configurando un informe final para su calificación. El formato de este informe final se comunicará oportunamente.

**El número de Prácticas será de tres y esta actividad no será obligatoria (ver más adelante en 3.5 su repercusión en la calificación final).**

## **2.6 Orientaciones sobre los ejercicios de autoevaluación**

El estudiante puede encontrar una amplia colección de ejercicios y problemas completamente resueltos en el Texto de la asignatura (en total 200). Las instrucciones para abordarlos como elemento fundamental del auto-estudio y como una buena preparación para afrontar la Prueba Personal se detallan dentro del apartado 2.8. Si necesitara más ayuda o entrenamiento en este sentido, puede dirigirse a la bibliografía auxiliar recomendada en donde encontrará libros de problemas resueltos.

## 2.7 Actividades complementarias (opcionales)

A continuación se presentan unas fuentes bibliográficas fundamentales y de recursos en la red complementarios para que el estudiante interesado pueda ampliar conocimientos si así lo desea. La bibliografía está comentada y se indica su utilidad para cada capítulo de los contenidos. Para darle una idea de la versatilidad de las técnicas que se estudian en esta asignatura se ha incluido una relación de revistas de investigación en diferentes disciplinas de la Química en las que se publican artículos que hacen un uso rutinario de dichas técnicas.

### NOTA SOBRE LA BIBLIOGRAFÍA Y LOS RECURSOS EN LA RED

Todos los textos que se relacionan a continuación están generalmente disponibles en las bibliotecas universitarias y, además, pueden adquirirse en el mercado libre (vía Internet: Amazon.com y similares) a precios muy razonables. En algunos casos, dependiendo de la obra y del momento, las propias editoriales pueden imprimir el texto solicitado bajo demanda. Si se tiene interés en seguir alguna de estas opciones, lo recomendable es hacer una pequeña indagación previa en la red.

**En las UDD de la asignatura se suministra una relación bibliográfica mucho más extensa y detallada.**

#### Bibliografía auxiliar recomendada.

- 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 cuestiones teóricas sobre ecuaciones diferenciales. La correspondiente versión inglesa, por el mismo autor, es *Numerical Analysis*, 2nd. Ed. (1986), 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).

- 3- V. P. Spiridonov y A.A. Lopatkin, *Tratamiento matemático de datos fisicoquímicos*, Mir, Moscú, 1973.

Uno de los primeros textos en español que se ocupó de describir a un nivel práctico, didáctico y certero, cómo tratar datos experimentales. Contiene ejemplos completamente desarrollados en su interior para ilustrar los procedimientos.

De interés especial para el capítulo

**Cap. 8:** (Caps. 4, 5)

Hay que notar que utiliza una técnica del tratamiento de los errores sistemáticos muy conservadora (suma de valores absolutos), que no es la que se sigue normalmente y difiere así de la del texto del curso M1.

También es de interés general para los capítulos del Programa siguientes:

**Cap. 5:** (Caps. 1, 2)

**Cap. 6:** (Caps. 2, 3)

**Cap. 7:** (Caps. 6, 7)

Contiene tablas estadísticas, particularmente las relativas a la  $F$  de Fisher son muy completas, pero hay que prestar atención a las definiciones precisas de las magnitudes que contienen (niveles de significación, y otras).

- 4- L. M. Sesé, *Métodos Teóricos de la Química-Física (Vol.1)*, UNED, Madrid, 1994. ISBN(13): 978 – 84 – 362 – 2544 – 0.

Este texto contiene descripciones y aplicaciones desarrolladas de las técnicas matemáticas habituales, tanto numéricas como estadísticas, en problemas típicos de la Química Física. Puede resultar pues un buen texto para ampliar conceptos y estudiar aplicaciones teóricas, si bien su nivel es elevado. De interés general para los capítulos del Programa siguientes son los temas (T) que se indican:

**Cap. 1:** (T. 1, 8)

**Cap. 2:** (T. 4)

**Cap. 3:** (T. 2)

- Cap. 4:** (T. 5)
- Cap. 5:** (T. 6, 7)
- Cap. 6:** (T. 7)
- Cap. 7:** (T. 8)
- Cap. 9:** (T. 3, 5)
- Cap. 10:** (T. 7, 9)

### Recursos en la red

- 5- [http://www.sciam.com/explore\\_directory.cfm](http://www.sciam.com/explore_directory.cfm)  
Página de Scientific American donde poder encontrar información sobre aplicaciones y métodos de cálculo en Química.
- 6- <http://www.netsci.org/Science/Compchem/feature17a.html>  
Un repaso cronológico a los distintos métodos de cálculo en Química Computacional.
- 7- <http://www.rsc.org>  
Página muy interesante de la que pueden descargarse cortos informes sobre regresión, calibración, optimización y diseño de experimentos. Editada por Analytical Methods Committee, Royal Society of Chemistry (Cambridge).
- 8- [http://www.uned.es/cemav/15m\\_electron.htm](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 razonamiento matemático en toda esta aventura del conocimiento. Incluye Guía Didáctica, video, seis programas de radio y cinco entrevistas TV con científicos.

### Fuentes de Investigación de la disciplina

En realidad todas las revistas de investigación científica en Química publican trabajos que de una u otra forma han realizado el correspondiente tratamiento de datos, bien de computación, bien estadístico. Las revistas que se reseñan a continuación poseen su correspondiente página web, que se localiza con facilidad con los buscadores en uso (Google, Yahoo, etc.). Aunque el acceso a los contenidos está restringido a usuarios autorizados, puede ser una buena práctica para el estudiante dirigirse a la información general que suministran. Esto le pondrá de alguna manera en contacto con el mundo de la investigación y las fronteras del conocimiento en la Química actual.

- 9 - *Analytical Chemistry*, American Chemical Society, Washington.
- 10- *Chemometrics*, Wiley, Nueva York.
- 11- *Electronic Journal of Theoretical Chemistry*, Wiley, Nueva York.
- 12- *Journal of Mathematical Chemistry*, Springer, Nueva York.
- 13- *The Journal of Chemical Physics*, American Institute of Physics, Nueva York.
- 14- *Journal of Chemical Theory and Computation*, American Chemical Society, Washington.
- 15- *Journal of Chemical Information and Modeling*, American Chemical Society, Washington.
- 16- *The Journal of Physical Chemistry A, B, y C*, American Chemical Society, Washington.
- 17- *Metrologia*, Institute of Physics, Londres.

### Lecturas Avanzadas (opcional; ver 3.2)

- 18- R. Carnap, O. Morgenstern, N. Wiener, y otros, *Matemáticas en las Ciencias del Comportamiento*, Alianza (Madrid), 1974.
- 19- R. Penrose, *The Emperor's New Mind*, Vintage (Londres), 1989.  
Capítulos: 3 ("Mathematics and reality"), 4 ("Truth, proof and insight").
- 20- R. Penrose, *The Road to Reality*, Vintage (Londres), 2005.

## 2.8 Metodología y estrategias de aprendizaje

Al tratarse de una materia fundamentalmente orientada a las cuestiones de índole práctica, aunque sin abandonar el razonamiento teórico, el aprendizaje deberá dirigirse de acuerdo con las siguientes ideas guía basadas en el estudio del texto base (UDD) y del uso conjunto de dicho texto, del manual de tablas matemáticas y de la calculadora de mano o de escritorio.

1. La resolución de problemas/ejercicios/cuestiones con un nivel de sofisticación alcanzable con cálculos que necesiten una calculadora de mano o escritorio. Se insiste aquí en que: *El objetivo general no es la memorización de fórmulas, sino saber: razonar con ellas, y en qué circunstancias y cómo deben ser aplicadas.*
2. La calculadora que se utilice en el estudio puede ser del tipo que el estudiante decida, programable o no programable (en este caso con las funciones matemáticas básicas trigonométricas, trascendentes). El uso de computadores puede ser útil para el estudio, pero se recuerda que en el examen sólo estará permitido un modelo máximo de calculadora (indicado en 2.4).
3. Se recomienda al estudiante que estudie los contenidos siguiendo las pautas siguientes:
  - i) Efectuar una primera **lectura comprensiva rápida** del capítulo que se aborde, **identificando** los conceptos y/o las técnicas fundamentales que contiene para situar mentalmente los contenidos. Conviene que el estudiante elabore personalmente su propio esquema de todo ello en esta fase. Aunque puede resultar obvio, la lectura (y el estudio) del capítulo en cuestión debe ser secuencial y en el orden que se presentan los contenidos. Los conceptos van generalmente concatenados y carece de sentido otra manera de abordarlos.
  - ii) **Observar** el tipo de problemas propuestos en las **PEC** para tener una idea concreta del tipo de preguntas a afrontar en el examen y orientar así adecuadamente el estudio.
  - iii) **Estudiar** las soluciones de los **ejercicios** intercalados en el capítulo y, al menos, *las de la mitad* de los problemas numéricos desarrollados en el texto base, siguiéndolas paso a paso. Esta es una etapa muy delicada, pues requiere reflexionar sobre lo que se está siguiendo, evitando la tendencia natural de copiar sin meditar lo que se ve escrito.

iv) **Revisar** con más profundidad el capítulo, prestando atención a los conceptos teóricos.

v) **Realizar** los **problemas teóricos**, ayudándose del texto en caso necesario, pero al igual que antes **meditando** sobre lo que se hace en cada uno.

vi) **Realizar** la **Prueba de Evaluación Continua (PEC)**, dividida en dos partes, en su momento (ver Plan de Trabajo, sección 1) una vez concluido el estudio de la parte correspondiente de la asignatura y enviarlas, vía sistema ALF del curso virtual, al Profesor Tutor Intercampus correspondiente para su corrección.

***Importante:** No es obligatoria, pero su realización contribuirá de manera importante en la evaluación final (3.5). La PEC dará al estudiante una buena idea del tipo de preguntas y problemas que encontrará en la Prueba Presencial, que por otra parte serán similares a los ejercicios y problemas que se encontrarán en el texto base (UDD).*

***vi) OPCIONAL:** Resolver de nuevo todos los problemas ayudándose del texto para consultar las fórmulas pertinentes, pero sin consultar las soluciones.*

4. Una indicación importante para la tarea descrita es que en la realización de bastantes de los problemas numéricos anteriores no es necesario llegar al mismo nivel de precisión numérica con el que se encuentran resueltos en el texto. El Profesor Tutor puede orientar muy bien en esta cuestión. En cualquier caso, la idea general es aprender el proceso de resolución y obtener un resultado lo suficientemente significativo como para que se garantice tal aprendizaje. A efectos de las Pruebas Personales (Exámenes) estas cuestiones estarán bien definidas, de manera que los estudiantes siempre sabrán a que atenerse en ellas.
5. Las directrices anteriores se materializan en el Plan de Trabajo en la forma orientativa de “número de horas” por capítulo, pero esto no pasa de ser una

“media” de rendimiento, ya que dependiendo del estudiante algunos temas van a ser más sencillos de seguir y otros menos.

6. En la Prueba Personal (o Examen escrito convencional) el estudiante **deberá utilizar el material auxiliar** (texto base de la asignatura UUDD + tablas matemáticas + calculadora) que se han detallado ya en esta Guía (2.4).

Como elemento adicional de **evaluación continua** está la realización de las **Prácticas** con paquetes informáticos (hoja **EXCEL**) para PC y bajo la supervisión del Profesorado Intercampus. En las circunstancias actuales, con la desaparición del apoyo en la mayoría de los Centros Asociados, el/la estudiante puede realizar estas prácticas en su propio domicilio y se insiste en la recomendación de que **refresque** la familiaridad que pueda haber adquirido durante sus estudios de enseñanza secundaria con los elementos de la hoja EXCEL. **Como ya se ha indicado, esta actividad de Prácticas no es obligatoria, pero su realización contribuirá de manera importante en la evaluación final (3.5)**

Es muy importante señalar en que el estudio de los capítulos del programa es una parte indispensable para poder abordar la realización de las Prácticas, pues en ellas se pueden abordar problemas relacionados con la asignatura que, o por su dimensión o por su complejidad, requieran del uso de tales medios informáticos (ordenador+hoja de cálculo+etc.). Así, parte de las horas de estudio dedicadas a los contenidos teóricos de la asignatura van a formar ya parte de la tarea y tiempo asociados a las Prácticas. Con vistas al Examen esto evidentemente es un gran beneficio. Tales contenidos de los capítulos del Programa de la asignatura deben pues utilizarse como guías de estudio previo para las Prácticas, al menos en las de aplicación directa de los conceptos numéricos y/o estadísticos (ver Plan de Trabajo y sección 3.3).



Por otra parte, al seguir este planteamiento se trata de evitar en la medida de lo posible que el estudiante utilice los recursos que presentan las citadas hojas de cálculo como “mágicas cajas negras”, sin saber lo que está haciendo y sin la capacidad de enjuiciar los resultados obtenidos. Esta actitud resulta muy perjudicial para la formación de un profesional universitario de la Química, o de las Ciencias en general, pues en Ciencia *cuanto más se sabe/conoce, la autonomía aumenta y esto te hace independiente.*

### 3. ORIENTACIONES PARA LA REALIZACIÓN DEL PLAN DE ACTIVIDADES

#### 3.1 Prueba de evaluación continua (PEC)

En esta asignatura se contempla la realización de una Prueba de Evaluación Continua (PEC), dividida en dos partes PEC1 y PEC2, que consistirá en la realización de una serie de ejercicios y problemas representativos de la materia estudiada. **No es de carácter obligatorio** para los estudiantes, pero se recomienda que la realicen, tanto para verificar su marcha en el aprendizaje, como por su influencia en la evaluación final (ver 3.5).

El encargado de seguir y calificar esta actividad es el Profesor Tutor Intercampus correspondiente, el cuál deberá devolverla al estudiante, con las correcciones pertinentes. **Habrán unas fechas definidas para entregar cada parte, y que se comunicarán oportunamente en el curso virtual (vía ALF).** La razón de esta entrega única, y no por problemas, de cada parte de la PEC una vez completada es la de proporcionar al estudiante una visión de conjunto de la materia estudiada, pues dentro de cada unidad temática hay fuertes conexiones entre sus capítulos, importantes para la comprensión de la materia, y que se perderían vanamente en una discusión acelerada y particular problema-a-problema.



Esta actividad, si se realiza completamente, contribuirá con un 20% de ponderación a la calificación final. Si no se realiza en su totalidad, es decir las dos partes, su contribución será proporcional al porcentaje antes indicado. Así, si el estudiante no realizara ninguna de sus dos partes, sólo podrá alcanzar una calificación final máxima en la asignatura de 8/10; si sólo realiza una de las dos partes, la calificación final máxima alcanzable en la asignatura sería de 9/10. Todo ello sin perjuicio de la influencia análoga derivada de la no realización de las Prácticas.

### 3.1.1 MODELO PEC-CÁLCULO NUMÉRICO Y ESTADÍSTICA APLICADA

#### 1ª PARTE / PEC1

**1. La siguiente tabla representa un polinomio cúbico  $y = p(x)$  y contiene dos errores**

$x$	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$y$	4	15	30	64	128	219	346	515	732

a) Identificar tales errores y corregirlos. b) Con la tabla corregida calcular el polinomio que la representa e interpolar en  $x = 8,5$  con un polinomio de Newton reversivo de segundo orden. c) Utilizando la tabla correcta y la aproximación de Stirling calcular la primera derivada numérica en  $x = 5$ . d) Utilizando la tabla correcta y la integración de trapecios calcular la integral entre  $x = 1$  y  $x = 9$ .

**2. Se desea investigar la correlación entre dos variables que responden a la tabla**

$x$	1,1	1,2	1,35	1,42	1,85
$y$	10,06	13,20	17,62	22,91	78,25

Obtener los ajustes de mínimos cuadrados: a)  $y = ax + b$ ; b)  $y = ax^2 + b$ ; c)  $y = ab^{(x^2)}$ ; b)  $y = ax^b$ . Atendiendo únicamente al valor del coeficiente de correlación calculado seleccionar el mejor ajuste.

**3. Dadas las tres funciones  $\{x, \sin x, \cos x\}$  definidas en el intervalo  $[0, \pi]$  con función de peso  $\omega(x) = 1$**

Obtener el conjunto normalizado. Calcular los productos escalares: a)  $\langle x, \sin x \rangle$ ; b)  $\langle x, \cos x \rangle$ ; c)  $\langle \sin x, \cos x \rangle$ . Procediendo secuencialmente en el orden que se dan las tres funciones construir el conjunto ortogonal utilizando el método de Schmidt.

**4. Calcular las raíces del determinante secular**

$$P(x) = \begin{vmatrix} 1-x & 1,1 & 0 \\ 1,1 & 2-x & 2,1 \\ 0 & 2,1 & 3-x \end{vmatrix} = ax^3 + bx^2 + cx + d = 0$$

**5. Una función de densidad de probabilidades tiene la forma**

$$f(x) = \begin{cases} 0 & -\infty < x < -2 \\ -kx & -2 < x < 0 \\ kx^2 & 0 < x < 2 \\ 0 & 2 < x < \infty \end{cases}$$

Obtener el valor de  $k$  para que esté normalizada. Calcular el valor medio, la desviación típica, la función integral y la probabilidad entre  $-1 \leq x < +1$ .

**2ª PARTE / PEC2**

**6. De una población normal se extraen las dos muestras de datos correspondientes a un mismo fenómeno siguientes**

$$M1 = \{1,82 ; 2,25 ; 2,20 ; 1,95 ; 2,10\}$$

$$M2 = \{1,93 ; 2,45 ; 2,30 ; 2,00 ; 2,15 ; 1,99\}$$

Calcular la estimación sesgada  $\tilde{s}^2$  de la varianza de M1; las estimaciones insesgadas de la media y de la varianza mejoradas por mezcla (“pooling”) de M1 y M2; el valor del estadístico de Fisher F para el cociente de las dos varianzas muestrales. ¿Es la varianza de M2 significativamente mayor que la de M1 al 5%? ¿difieren las dos medias muestrales significativamente al 5%?

**7. La siguiente tabla representa una relación entre dos variables**

x	3,8	4,1	5,0	5,9	7,6	9,7
y	4,2	7,5	6,0	8,3	7,6	10,1

Utilizar el análisis no paramétrico de Spearman y obtener el coeficiente de correlación  $r_s$ . Utilizando un ajuste lineal convencional de mínimos cuadrados calcular su coeficiente de correlación  $r$ . Obtener la media y varianza de la suma D de los cuadrados de las diferencias

entre los rangos Spearman en ausencia de correlación. ¿Es significativamente  $r_s \neq 0$  al nivel del 5%?

**8. Dada la expresión**

$$y = y(x_1, x_2, A, B) = \frac{ax_1}{(x_2 - B)} - \frac{A}{x_2^2}$$

**en donde  $a$  está libre de error y el resto de los parámetros y variables no lo están, se desea evaluarla en  $(x_1, y_1) = (1 \pm 0,1, 5 \pm 0,5)$  sabiendo que  $A = 3,5 \pm 0,4$   $B = 0,2 \pm 0,02$   $a = 0,5$**

- Si los errores que se indican en el enunciado son de entrada ( $\Delta$ ) y no estadísticos, calcular el error total  $\Delta y$ .
- Si los errores que se indican en el enunciado son accidentales (estadísticos,  $\sigma$ ), calcular la varianza total  $\sigma^2(y)$   
Comparar los resultados obtenidos.

**9. Utilizar el método RK-IV con espaciado  $h=0,2$  y partiendo de la condición inicial  $(x_0, y_0) = (1, 1)$  para calcular numéricamente la solución de la ecuación diferencial**

$$y' = \frac{y}{x} - y^2$$

**en  $1 \leq x \leq 2$ . Dar los resultados con cuatro decimales.**

**10. La siguiente tabla contiene cuatro muestras de datos y se quiere investigar si las medias muestrales son homogéneas, es decir si las poblaciones Gaussianas de las que se han extraído tienen la misma media**

Muestra	Valores $x$			
<b>A</b>	38	37	40	37
<b>B</b>	35	37	39	36
<b>C</b>	32	37	36	35

**(se supone que las varianzas muestrales son homogéneas). Obtener la varianza debida al factor aleatorio y discutir si las medias muestrales son homogéneas a los niveles  $\alpha = 0,05$ , y  $\alpha = 0,01$ .**

### **3.2 Prácticas con EXCEL (PC)**

En cuanto al programa de Prácticas relativas al tratamiento de datos con EXCEL las realizará cada estudiante en su domicilio y serán opcionales. Estarán bajo la supervisión del Profesor Tutor Intercampus correspondiente y contribuirán, si se realizan, a la calificación final con un 10% adicional. Caso de no realizarse, originarían una pérdida en la calificación final del 10%; es decir, la máxima calificación alcanzable sería en este caso de 9 /10, y ello sin perjuicio de la situación análoga derivada de la no realización de alguna de las partes o la totalidad de la PEC, que ocasionarían también la disminución correspondiente.

Las Prácticas, en principio y por el momento, son una actividad personal, de acuerdo con las circunstancias mencionadas anteriormente. Por lo que respecta al momento preciso de su realización durante el periodo lectivo, su composición exacta (3 prácticas), y entrega al Tutor correspondiente a través de la plataforma ALF, se comunicarán oportunamente a través del curso virtual contenido en la plataforma ALF. Se insiste en la necesidad de que el estudiante se ponga al día en el manejo de las características elementales de la herramienta de cálculo EXCEL.

**NOTA.- Otras apreciaciones relativas a la evaluación continua que pudiera hacer el Profesor Tutor sobre el rendimiento de los estudiantes puede extraerlas de las participaciones en las tutorías y otras actividades, pudiendo quedar finalmente englobadas dentro de la calificación final del conjunto PEC+PC.**

### **3.3 Prueba personal o examen presencial (EP)**

***Es la única actividad obligatoria para poder superar la asignatura.***

**Se podrá utilizar el siguiente material de consulta y auxiliar (M2, y M3 detallados en la sección 2.4):**

- M0. Cualquier tipo de material escrito, en forma de apuntes y/o libros, que el estudiante estime útil o procedente. Los libros aquí incluidos pueden estar anotados.**
- M2. Unas Tablas Matemáticas que pueden estar anotadas. Se recomienda llevar las citadas anteriormente (Serie Schaum).**
- M3. La calculadora con las características ya mencionadas en Recursos de Apoyo.**
- **No se autorizará el intercambio de cualquiera de los tres elementos anteriores durante la sesión de examen presencial. Se recuerda pues ir a este examen adecuadamente provisto también de material de escritura (bolígrafos, lápices, etc.) y de baterías de repuesto para la calculadora. Queda excluido el uso de:**
    - a) Material fotocopiado sujeto a derechos de autor.**
    - b) Teléfonos móviles, microordenadores, ordenadores portátiles y similares.**
  - Constará de cuatro (4) problemas sobre los contenidos de la asignatura. Estos problemas serán similares a los que se encuentran en el texto de la asignatura y a los que se proponen en la PEC.
  - Cada uno de estos problemas presentará al estudiante preguntas o cuestiones que deberán responderse de manera razonada y en espacio prefijado. Tales preguntas o cuestiones pueden o no estar relacionadas entre sí, y podrán ser de cálculo, de razonamiento teórico, o de ambas. **El formato general de problema con desarrollo es el mostrado en el modelo de PEC (3.1.1).**
  - Cada problema completa y correctamente resuelto contribuirá con 2,5 puntos (sobre 10 del examen). De haber varias cuestiones a responder, se aplicaría este criterio sobre las partes proporcionales correspondientes a cada una de ellas para obtener la calificación final.

- Los errores conceptuales graves (del tipo logaritmos de números negativos – la asignatura no trata con variable compleja-, y similares) serán penalizados, pudiendo ocasionar dependiendo del caso y número de estos errores una calificación nula del problema involucrado.
- **Esta actividad EP contribuirá con el 70% a la calificación final (ver más adelante en 3.5).**

### 3.4 Actividades complementarias: lecturas avanzadas

Las siguientes actividades son lecturas avanzadas opcionales y están dirigidas únicamente a los estudiantes que hayan asimilado bien los contenidos de la asignatura y puedan dedicar una pequeña parte de su tiempo de estudio a conseguir visiones complementarias de la materia estudiada. Tampoco es necesario que dichos estudiantes las realicen todas y debajo se indican en un orden a seguir que puede cortarse en cualquier punto para parar allí. En cualquier caso, se recomienda en los casos indicados efectuar al menos dos de tales lecturas: una de conocimientos matemáticos generales y otra de Probabilidad y Estadística. Las obras donde encontrarlas han sido ya citadas anteriormente, pero se reproducen íntegramente aquí por comodidad de referencia.

- A) R. Penrose, *The Emperor's New Mind*, Vintage (Londres), 1989.  
Capítulos: 3 (“Mathematics and reality”), 4 (“Truth, proof and insight”).

Dos capítulos muy útiles para ampliar las perspectivas del estudiante en lo que se refiere al mundo de las matemáticas y sus aplicaciones en las ciencias naturales. Los estudiantes interesados en cuestiones computacionales pueden encontrar de valor también los dos primeros Capítulos de este excelente libro: 1 (“Can a computer have a mind?”), 2 (“Algorithms and Turing Machines”). Como lectura obligada está la del capítulo 3, siguiendo en esta línea la del capítulo 1. Las otras dos lecturas restantes son de mayor complejidad.

- B) R. Carnap, O. Morgenstern, N. Wiener, y otros, *Matemáticas en las Ciencias del Comportamiento*, Alianza (Madrid), 1974.  
“El análisis de la incertidumbre: la probabilidad”, pp. 11-86 (cinco ensayos por diferentes autores): 1º por A. J. Ayer, “Posibilidad, probabilidad y casualidad”; 2º por R. Carnap, “¿Qué es la probabilidad?”; 3º por J. Cohen, “Probabilidad subjetiva”; 4º por M. Kac, “Probabilidad”; 5º por D. D. McCracken, “El método de Monte Carlo”.

Todos los ensayos pueden ayudar al lector a configurar una muy buena idea de la evolución del concepto de probabilidad y de su papel en una gran variedad de temas. En concreto, las cuatro primeras son de utilidad para complementar el capítulo 5 del programa, mientras que



la quinta lo es para los capítulos 5,6 y sobre todo el 10. El orden indicado es el recomendado para realizarlas y/o detener esta actividad en alguna de ellas.

C) R. Penrose, *The Road to Reality*, Vintage (Londres), 2005.

Capítulos: 1 (“The roots of science”), 2 (“An ancient theorem and a modern question”), 3 (“Kinds of numbers in the physical world”), 4 (“Magical complex numbers”), 5 (“Geometries of logarithms, powers, and roots”), 6 (“Real-number calculus”), 7 (“Complex-number calculus”), 9 (“Fourier decompositions and hyperfunctions”).

Todos los capítulos son de un gran interés tanto por lo que contienen como por el ágil y atrayente estilo del autor. En cuanto al orden de lectura y la posibilidad de detener esta actividad hay que tener en cuenta lo siguiente.

Los cuatro primeros son básicos y se recomienda su lectura secuencial para refrescar conocimientos.

El resto son de un nivel bastante más avanzado; en ellos se tratan cuestiones de variable compleja, algo normalmente sobre lo que no se hace un gran hincapié en el currículo formativo del estudiante de Química, y quedan recomendados sólo a los estudiantes muy aventajados. Una lectura completa del Cap. 9 requeriría también del Cap. 8 que trata de las superficies de Riemann, si bien esto se escapa ya de los objetivos del curso.

### 3.5 Criterios de evaluación final

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

- ✓ PEC. Prueba de Evaluación Continua (**no obligatoria**): PEC1 (1ª parte) y PEC2 (2ª parte), comprendiendo cada una la mitad del temario y conteniendo problemas representativos de la materia correspondiente estudiada. El formato de estos problemas será el mismo que el del Examen o Prueba Presencial como se ha señalado en 3.4.
- ✓ PC. Prácticas con Computador y paquete/hoja de cálculo EXCEL (**no obligatorias**).
- ✓ EP. Examen Presencial **obligatorio** y con duración máxima de 2 horas.

El porcentaje con el que cada una de las tres actividades anteriores contribuirá a la evaluación final y las normas para su aplicación se detallan a continuación:

- ✓ PEC: 20% (dos partes independientes: 10%+10%)
- ✓ Prácticas EXCEL PC: 10%.
- ✓ Examen EP: 70%.

Es decir, tomando como 10 el máximo en cada una de las actividades, la calificación final CF será (sobre 10) la media ponderada:

$$CF = (0,1 \times PEC1) + (0,1 \times PEC2) + (0,1 \times PC) + (0,7 \times EP)$$

El criterio utilizado es 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  $PEC+PC$  en la última por comodidad.

**En la aplicación del promedio anterior se tendrán en cuenta las siguientes normas generales:**

- Si un estudiante no realiza el examen presencial, **no superará la asignatura**. El promedio anterior no será aplicable en estas condiciones.
- No existe una “nota de corte” en el examen para aplicar el promedio.
- **Cualquier actividad de evaluación continua (PEC1, PEC2, PC) no realizada contribuirá con una calificación 0 (cero) al promedio.**
- **La asignatura se superará alcanzando**  $CF \geq 4,9$ .

La calificación se graduará como:

**NO APTO:**  $CF < 4,9$ .

**APROBADO:**  $4,9 \leq CF < 7$ .

**NOTABLE:**  $7 \leq CF < 9$ .

**SOBRESALIENTE:**  $CF \geq 9$ .

Las **MATRICULAS DE HONOR**, dependiendo del número de ellas que puedan concederse, se asignarán entre los estudiantes que hayan obtenido las mejores calificaciones con la condición  $CF > 9$ .

## 4. BREVE GLOSARIO DE TÉRMINOS GENERALES

*A continuación se presenta un breve glosario de términos relacionados con la asignatura. No es exhaustivo y las definiciones son concisas. En general, tampoco se hace referencia a conceptos matemáticos básicos que forman parte de otras asignaturas o cursos. Se pretende únicamente orientar sobre los correspondientes conceptos situándolos en su contexto. Su estudio detallado puede realizarse en el texto base. Un glosario mucho más extenso y detallado puede encontrarse en el texto base de la asignatura.*

### A

**Admisión y rechazo de hipótesis:** proceso para establecer con una validez estadística, determinada mediante un porcentaje de fiabilidad, diferentes proposiciones sobre una muestra de datos, objetos, etc.

**Aleatoriedad:** característica de ciertos procesos y/o fenómenos que impide predecir con exactitud los resultados concretos que se obtendrán para ellos en un experimento.

**Análisis de la varianza (ANOVA):** técnica fundamental en el análisis de datos experimentales con la que se puede evaluar la homogeneidad de éstos y permite identificar efectos diversos sobre ellos.

**Argumentos:** en tablas de datos, los valores de la(s) variable(s) independiente(s). En una tabla bidimensional son los valores de la variable  $x$ .

**Asimetría de una distribución de probabilidad:** medida de la distorsión que una distribución de probabilidades presenta alrededor de su valor medio.

### B

**Base completa:** conjunto de funciones que sirve para desarrollar funciones definidas sobre el mismo intervalo que dicha base. Este concepto va ligado al de función de peso.

**Base ortonormal:** conjunto de funciones definidas en un intervalo que siendo completo presentan la propiedades de ser ortogonales por parejas estando, además, normalizadas (“longitud unidad”) cada una de ellas.

**Bondad de un ajuste:** medida de la proximidad de un ajuste mediante una función o funciones determinadas a una serie de datos discretos o a otra función arbitraria.

### C

**Cifras significativas:** cifras que tienen sentido para ser dadas en un resultado.

**Coefficiente de correlación:** medida estadística de la bondad de un ajuste de datos en dos o más dimensiones, o de la relación entre dos o más variables.

**Control de calidad:** operación fundamental en la producción de bienes y servicios que permite detectar errores de procedimiento y subsanarlos.

**Correcciones de continuidad:** artificio que corrige los defectos asociados con la representación de una distribución de probabilidades discreta mediante una distribución continua.

**Correlación:** relación estadísticamente significativa entre dos o más variables (aleatorias).

**Covarianza:** magnitud que mide las variaciones conjuntas de dos variables aleatorias.

**Cuartiles:** tres puntos particulares en una distribución de probabilidad que la dividen en cuatro porciones que encierran cada una el 25% de la masa total de probabilidad.

## D

**Decisión estadística:** resultado que se toma como conclusión de un test o ensayo de hipótesis y que tiene validez estadística, es decir puede ser errónea aunque por un estrecho margen

**Degeneración y multiplicidad:** fenómeno ligado a la aparición de raíces múltiples en la solución de un sistema homogéneo.

**Derivación numérica:** cálculo numérico aproximado de la derivada de una función dada en forma de tabla de puntos.

**Desviación típica (estándar):** medida de la dispersión de una colección (finita o infinita) de datos alrededor de su valor medio-

**Diferencia en una tabla bidimensional de datos:** en una tabla igualmente espaciada, resultado de restar dos valores y consecutivos (el sustraendo es el de mayor abscisa).

**Distribución binomial:** distribución de probabilidades discreta que se utiliza cuando el experimento aleatorio sólo presenta dos posibilidades.

**Distribución *chi*-cuadrado:** distribución continua de probabilidades muy útil en el estudio de pequeñas muestras.

**Distribución *F* de Fisher:** distribución continua de probabilidades que forma la base de las aplicaciones ANOVA.

**Distribución Gaussiana (normal):** distribución continua de probabilidades por excelencia, pues es el límite esperado cuando intervienen muchos fenómenos diversos en un experimento.

**Distribución de Poisson:** distribución continua de probabilidades límite de la binomial cuando la probabilidad de un suceso es muy pequeña.

**Distribución de probabilidades:** tabla o función que representa sucesos frente a sus probabilidades respectivas.

**Distribución logarítmico-normal:** distribución continua de probabilidades derivada de la distribución normal.

**Distribución *t* de Student:** distribución continua útil en el estudio de pequeñas muestras.

## E

**Ensayo bilateral:** ensayo o test de hipótesis estadísticas en el que se consideran las dos colas de la distribución de probabilidades.

**Ensayo unilateral:** ensayo o test de hipótesis estadísticas en el que se considera sólo una de las colas de la distribución de probabilidades.

**Error absoluto:** valor absoluto de la diferencia entre el valor real y el aproximado.

**Errores experimentales:** errores que se producen en los procesos de medición de un experimento. Pueden ser de escala, sistemáticos y accidentales.

**Error de entrada:** error con el que vienen afectados los datos que definen un cálculo.

**Error de redondeo:** error derivado del manejo de números aproximados por redondeo de cifras en ellos.

**Error tipo I:** en verificación de hipótesis estadísticas, rechazar una hipótesis cuando es correcta.

**Error tipo II:** en verificación de hipótesis estadísticas, aceptar una hipótesis que es falsa.

**Error ppm:** error expresado en partes por millón.

**Error relativo:** cociente entre el error absoluto y el valor real de una magnitud.

**Error RMS:** en ajustes de mínimos cuadrados, la raíz cuadrada de la media de la suma de los cuadrados de las desviaciones.

**Error de truncamiento (algoritmo):** tipo de error numérico asociado con la inevitable decisión de tener que tomar un número finito de términos en una aproximación para representar una función.

**Espacio de estados (sucesos):** conjunto de resultados que pueden aparecer en la realización de un experimento aleatorio.

**Estadística descriptiva:** enfoque estadístico que se ocupa de la mera descripción de conjuntos de datos sin extender las conclusiones a la población de la que proceden.

**Estadística inductiva:** enfoque estadístico que se ocupa inferir las propiedades de una población a partir del estudio de muestras extraídas de ella.

**Estadística teórica:** enfoque estadístico cuyo lenguaje está basado en el uso de funciones de distribución de probabilidades para describir poblaciones.

**Estabilidad:** comportamiento razonablemente predecible y no divergente en una serie de cálculos.

**Estabilidad de frecuencias relativas:** fenómeno por el que se alcanzan resultados límite constantes para las frecuencias relativas de los sucesos de un experimento aleatorio cuando el número de ensayos es muy grande.

**Estadística no paramétrica:** enfoque estadístico (robusto) en el que el tratamiento de datos hace abstracción de los valores concretos de éstos.

**Estadística robusta:** enfoque estadístico de análisis de datos que muestra una sensibilidad menor a la dispersión en éstos que la de los métodos convencionales.

**Estadísticos (estimadores):** en el estudio de muestras, cantidades aleatorias que se definen matemáticamente para que sean aproximaciones a los valores poblacionales.

**Exactitud:** en mediciones experimentales (o cálculos aproximados), la cercanía entre las medidas (o el resultado numérico) y el valor real de una magnitud.

**Experimentos bivariantes:** experimentos que se describen a través de dependencias funcionales entre dos variables ( $x, y$ ).

**Experimentos multivariantes:** experimentos que se describen a través de dependencias funcionales entre más de dos variables.

## F

**Factores de variación:** en análisis de datos, causas que influyen en el resultado de un experimento. Sus efectos pueden aislarse y evaluarse con ANOVA.



**Función de peso:** funciones definidas en determinados intervalos y que sirven para definir el producto escalar de funciones.

**Función densidad de probabilidad:** una forma de dar la función de distribución de probabilidad de un problema con variables continuas. Necesariamente debe ser no negativa.

**Función integral (cumulativa) de probabilidad:** cantidad que representa la probabilidad acumulada desde  $-\infty$  hasta un punto del espacio del problema. Es una integral sobre la densidad de probabilidad.

## G

**Generadores congruentes:** generadores de números pseudoaleatorios que explotan las propiedades de congruencia entre números enteros.

**Grados de libertad:** en teoría de pequeñas muestras, el número de datos disponibles menos el número de parámetros que se han estimado con ellos.

**Gráfico de control:** representación gráfica utilizada en controles de calidad que permite detectar situaciones anómalas o procedimientos defectuosos.

## H

**Homogeneidad de muestras:** concepto mediante el que se indica que un conjunto de muestras es consistente y procede de una misma población estadística.

**Homogeneidad de medias:** concepto mediante el que se indica que un conjunto de medias es consistente y procede de una misma población estadística.

**Homogeneidad de varianzas:** concepto mediante el que se indica que un conjunto de varianzas es consistente y procede de una misma población estadística.

## I

**Igualdad de probabilidades *a priori*:** hipótesis que caracteriza a los diferentes estados de un espacio como equiprobables.

**Integración numérica:** aplicación de diferentes algoritmos para obtener respuestas numéricas a integraciones definidas.

**Integración Monte Carlo:** integración numérica basada en un muestreo estadístico del intervalo de definición que utiliza números aleatorios para calcular el integrando.

**Interpolación:** operación de cálculo del valor de una función definida por una tabla en un punto (abcisa, en una dimensión) interior a ella pero no tabulado como dato de entrada.

**Intervalo de confianza:** intervalo dentro del que con una cierta probabilidad prefijada es de esperar que se encuentre el valor real de una magnitud o propiedad.

**Ley de grandes números:** propiedad por la que al efectuar un número muy elevado de ensayos se estabilizan determinados resultados como por ejemplo las frecuencias relativas de aparición de sucesos, los valores medios de magnitudes, etc.

**Ley de propagación de errores:** método general aproximado para el cálculo de la influencia (el error) de los diversos errores estadísticos que intervienen en un proceso de medición.

## M

**Marcas de clase:** límites que definen intervalos finitos mediante los que se describen a valores agrupados una variable. Están relacionados con las correcciones de continuidad.



**Masa de probabilidad:** convencionalmente cantidad de probabilidad contenida en un intervalo. La “masa” total de una distribución de probabilidades se define como la unidad.

**Matriz ortogonal (rotación):** matriz cuadrada cuya inversa es igual a su transpuesta (base ortonormal).

**Media muestral:** el valor medio (media aritmética) de los datos que componen una muestra.

**Media poblacional:** el centro de “gravedad” de una distribución de probabilidades.

**Mediana muestral:** valor que deja a cada uno de sus lados un número igual de datos de la muestra.

**Mediana poblacional:** valor que deja a cada uno de sus lados el 50% de la masa total de probabilidad.

**Método de Gauss:** método de resolución de un sistema lineal de ecuaciones que lo reduce a forma triangular superior.

**Método predictor-corrector:** método de resolución numérica de ecuaciones diferenciales (ordinarias) basado en la aplicación de dos fórmulas, la predictora y la correctora.

**Método de punto fijo:** método de resolución de ecuaciones en el que sólo se necesita un punto previo para producir una nueva estimación de la raíz buscada.

**Métodos de dos puntos:** métodos de resolución de ecuaciones no lineales que necesitan dos puntos para producir una nueva estimación de la raíz buscada.

**Métodos de Runge-Kutta:** métodos numéricos de resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias.

**Mezcla (“pooling”) de magnitudes muestrales:** método de combinación de magnitudes análogas procedentes de diferentes muestras para obtener una nueva estimación mejorada de tales magnitudes.

**Moda:** valor de una variable aleatoria en la que ésta toma el máximo absoluto.

**Muestra:** conjunto de datos o resultados extraídos de una población estadística. Puede ser de diversos tipos dependiendo del método por el que se ha obtenido.

**Muestreo:** operación diseñada para extraer una muestra. Puede efectuarse de diversas maneras (al azar, estratificado, etc.).

## N

**Nivel de significación:** el error del tipo I en verificación de hipótesis estadísticas. Define el intervalo de confianza de tomar la decisión acertada como su complementario (sobre 100 si se expresa en %).

**Norma de un vector:** magnitud que en espacios vectoriales se define como la raíz cuadrada positiva del producto escalar de un vector por sí mismo.

**Números aleatorios:** números enteros del 0 al 9 presentados en forma de una tabla en la que no se producen correlaciones entre ellos. Son una representación de un comportamiento puramente al azar..

## O

**Ortogonalidad:** entre dos funciones (“vectores” de un espacio funcional), cuando su producto escalar es nulo.

**P**

**Papel doble logarítmico:** tipo especial de papel gráfico en el que se representan los valores del logaritmo de la variable dependiente frente a los valores del logaritmo de la variable independiente. Normalmente, la base logarítmica tomada es la base 10.

**Papel milimetrado:** tipo de papel gráfico convencional en el que se representan los valores de la variable dependiente frente a los valores de la variable independiente. La división más pequeña que puede apreciarse visualmente en ambos ejes es el milímetro.

**Papel normal (de probabilidad):** tipo especial de papel gráfico utilizado para realizar ajustes Gaussianos.

**Papel semi-logarítmico:** tipo especial de papel gráfico en el que se representan los valores del logaritmo de la variable dependiente frente a los valores de la variable independiente. Normalmente, la base logarítmica tomada es la base 10.

**Parámetros poblacionales y muestrales:** magnitudes que permiten caracterizar de manera simple en la práctica conjuntos de datos estadísticos.

**Parábola de mínimos cuadrados:** parábola que se ajusta a una serie de datos bidimensionales siguiendo el criterio de minimizar la suma de los cuadrados de las desviaciones en cada punto.

**Pivote:** en un sistema de ecuaciones lineales, el coeficiente de mayor valor absoluto. Utilizado en el método de Gauss.

**Plano de mínimos cuadrados:** plano que se ajusta a una serie de datos tridimensionales siguiendo el criterio de minimizar la suma de los cuadrados de las desviaciones en cada punto.

**Población:** conjunto completo de todos los resultados posibles para una variable aleatoria.

**Polinomio característico:** polinomio resultante de igualar a cero el determinante de los coeficientes de un sistema homogéneo.

**Polinomio de colocación:** polinomio que toma los mismos valores que la función dada en forma de tabla a la que representa.

**Polinomios ortogonales:** diferentes familias de funciones polinómicas, definida cada una en un intervalo característico y con una determinada función de peso, cuyos productos escalares dos a dos son nulos.

**Polinomios trigonométricos:** expresiones que utilizan funciones seno y coseno para representar con un criterio de mínimos cuadrados funciones discretas y periódicas.

**Potencia del criterio estadístico:** magnitud que da la probabilidad de rechazar la hipótesis estadística que se analiza cuando ésta es falsa.

**Precisión:** en experimentos aleatorios, el grado de proximidad entre los diferentes resultados para una misma variable, siendo mayor cuanto más próximos se encuentren entre sí. En cálculo numérico, el número de cifras estables exigidas en un resultado que se obtiene a través de un proceso iterativo o de redondeo.

**Probabilidad:** número adimensional que cuantifica la posibilidad de aparición de sucesos, aparición que resulta impredecible con exactitud a priori.

**Producto escalar de funciones:** generalización del concepto de producto escalar entre vectores de un espacio vectorial y que viene expresado para dos funciones reales mediante el valor de la integral definida, sobre un intervalo y con función de peso, del producto de ambas.

**Propagación de errores:** en expresiones matemáticas, estudio mediante el desarrollo de Taylor de la influencia sobre el resultado final de los errores de entrada en las variables que intervienen en un cálculo; en una tabla de diferencias, diferentes patrones de signos que

pueden producirse como consecuencia de uno o varios errores en los datos de entrada en una tabla.

## R

**Raíces (ceros) de una ecuación:** soluciones de la ecuación igualada a cero.

**Recta de mínimos cuadrados:** recta que se ajusta a una serie de datos bidimensionales siguiendo el criterio de minimizar la suma de los cuadrados de las desviaciones en cada punto.

**Redondeo:** operación por la que se suprimen cifras (a la derecha) de un resultado. Normalmente se toma por exceso sobre la última cifra conservada.

**Regresión:** operación de estimación de una variable dependiente para valores de las variables independientes a través de una relación funcional determinada a partir de un conjunto de datos mediante mínimos cuadrados o técnicas robustas. Puede tomar diversas formas funcionales.

**Relaciones empíricas:** relaciones matemáticas aproximadas que pretenden representar a la relación funcional entre variables únicamente dentro de un intervalo para el que se conocen datos.

## S

**Separación de raíces:** método de localización de las raíces de una ecuación dentro de intervalos disjuntos.

**Sesgo:** coeficiente que mide la asimetría de una distribución de probabilidades.

**Singularidades:** puntos (finitos) en los que una función o sus derivadas divergen.

**Sistema de ecuaciones normales:** en mínimos cuadrados, el sistema lineal que surge de aplicar las condiciones necesarias de minimización.

**Suceso aleatorio (estocástico):** suceso cuyo resultado no es predecible *a priori* y que puede caracterizarse mediante una variable de naturaleza probabilista (aleatoria)

**Sucesos excluyentes:** sucesos que no pueden darse simultáneamente.

**Sucesos independientes:** sucesos cuyas apariciones respectivas no se ven influidas en modo alguno unas por otras.

## T

**Tabla de diferencias:** herramienta muy conveniente de cálculo para obtener los diversos polinomios de colocación cuando los argumentos están igualmente espaciados.

**Tamaño de una muestra:** el número de datos que componen la muestra.

**Teorema central del límite:** teorema que establece la distribución normal como aplicable (límite) a un fenómeno cuando sobre éste se sabe que influyen muchas variables aleatorias.

**Teoría de pequeñas muestras:** conjunto de métodos y distribuciones de análisis estadístico de utilidad para estudios que implican muestras finitas y con pocos elementos.

**Transformación ortogonal:** operación matricial de semejanza que deja invariante la longitud de un vector.

**Traza de una matriz:** la suma algebraica de los elementos de su diagonal principal.

## V

**Valor medio:** la media de un conjunto de datos. Puede ser de varios tipos: aritmética, cuadrática, armónica, etc.

**Variable aleatoria:** variable que se utiliza para describir un proceso o fenómeno aleatorio.

**Variable tipificada:** en un análisis estadístico, transformación de la variable original del problema a otra equivalente con media nula y desviación típica unidad.

**Varianza poblacional:** el cuadrado de la desviación típica.

**Varianza muestral:** varianza de una serie de datos extraídos de una población.

**Verificación de hipótesis estadísticas:** técnica muy poderosa de la Estadística Inferencial que permite evaluar situaciones sobre bases probabilísticas rigurosas.

### CRONOGRAMA POR CAPÍTULOS/ACTIVIDADES (1/3)

SEMANA	CAPÍTULO	ACTIVIDADES ( 1)	horas	ACTIVIDADES ( 2)	horas	Total de horas
1	Capítulo 1 Ajustes polinómicos	Asistencia Tutoría Intervención en curso virtual	1 0,5	Lectura comprensiva Realización de Ejercicios y Problemas Estudio Teórico	1 3 1	6,5
2	Capítulo 2 Desarrollos ortogonales	Asistencia Tutoría Intervención en curso virtual	1 0,5	Lectura comprensiva Realización de Ejercicios y Problemas Estudio Teórico	1 3 2	7,5
3	Capítulo 3 Aplicaciones numéricas	Asistencia Tutoría Intervención en curso virtual	1 0,5	Lectura comprensiva Realización de Ejercicios y Problemas Estudio Teórico	1 6 3	11,5
4	Capítulo 4 Ecuaciones y sistemas	Asistencia Tutoría Intervención en curso virtual	1 0,5	Lectura comprensiva Realización de Ejercicios y Problemas Estudio Teórico	1 4 2	8,5
5	Capítulo 5 Distribuciones de probabilidad	Asistencia Tutoría Intervención en curso virtual	1 0,5	Lectura comprensiva Realización de Ejercicios y Problemas Estudio Teórico	1 5 4	11,5

### CRONOGRAMA POR CAPÍTULOS/ACTIVIDADES (2/3)

SEMANA	CAPÍTULO	ACTIVIDADES ( 1)	horas	ACTIVIDADES ( 2)	horas	Total de horas
6	Capítulos 1-5			REPASO: Realización de Ejercicios y Problemas Asistencia Tutoría Lecturas Recomendadas (*) PEC (1ª parte) -OPCIONAL- Corrección PEC	3 1 1 6 1	12
7	Capítulo 6 Muestreo, Estimación y Decisión	Asistencia Tutoría Intervención en curso virtual	1 0,5	Lectura comprensiva Realización de Ejercicios y Problemas Estudio Teórico	1 5 2	9,5
8	Capítulo 7 Correlación, Regresión y E. no paramétrica	Asistencia Tutoría Intervención en curso virtual	1 0,5	Lectura comprensiva Realización de Ejercicios y Problemas Estudio Teórico	1 4 2	8,5
9	Capítulo 8 Tratamiento de errores experimentales	Asistencia Tutoría Intervención en curso virtual	1 0,5	Lectura comprensiva Realización de Ejercicios y Problemas Estudio Teórico	1 3 1	6,5



### CRONOGRAMA POR CAPÍTULOS/ACTIVIDADES (3/3)

SEMANA	CAPÍTULO	ACTIVIDADES ( 1)	horas	ACTIVIDADES ( 2)	horas	Total de horas
10	Capítulo 9 Métodos avanzados de cálculo y sim. numérica	Asistencia Tutoría Intervención en curso virtual	1 0,5	Lectura comprensiva Realización de Ejercicios y Problemas Estudio Teórico	1 5 2	9,5
11	Capítulo 10 Métodos estadísticos de sim. y validación	Asistencia Tutoría Intervención en curso virtual	1 0,5	Lectura comprensiva Realización de Ejercicios y Problemas Estudio Teórico	1 5 2	9,5
12	Capítulos 6-10			REPASO: Realización de Ejercicios y Problemas Asistencia Tutoría Lecturas Recomendadas PEC (2 parte) –OPCIONAL- Corrección PEC	3 1 1 6 1	12
13	PRÁCTICAS(*) -fechas que se comunicarán oportunamente-	PRÁCTICAS -OPCIONALES - Realización Informe Corrección	7 2 1			10

Pº Senda del Rey 9  
28040, Madrid

Tel: 91 398 73 78  
Fax: 91 398 83 76

<http://www.uned.es/dpto-fisicoquimica>