

Plan 216 Ing.Tec.Ind. Esp en Química Ind.

Asignatura 16278 QUIMIOMETRIA ANALITICA

Grupo 1

Presentación

Evaluación estadística de la calidad de las medidas. Planificación diseño y optimización de experimentos. Regresión multivariante de parámetros analíticos.

Programa Básico

Objetivos

Esta asignatura tiene como finalidad fundamental la aplicación y puesta a punto de distintos métodos estadísticos al control de calidad en laboratorios químicos.

Programa de Teoría

Tema 1. ERRORES EXPERIMENTALES. ESTADÍSTICA DE MEDIDAS REPETIDAS.

Introducción. Tipos de errores. Precisión y exactitud. Conceptos estadísticos. Media y desviación estándar. Distribución de errores. Límites de confianza de la media. Presentación de resultados. Propagación de errores.

Tema 2. PRUEBAS DE SIGNIFICACIÓN

Introducción. Comparación de la precisión de dos muestras. Comparación de la media de dos muestras. Comparación de la media de una muestra y una población. Comparación de resultados apareados. Las pruebas de una y dos colas. Comparación de las medias de varias muestras (ANOVA) Valores anómalos. La prueba chi cuadrada. Comprobación de la normalidad de una distribución. Conclusiones a partir de las pruebas de significación. Tests no paramétricos.

Tema 3. MUESTREO Y CONTROL ESTADÍSTICO DE CALIDAD. Muestreo. Parámetros muestrales y estrategias. Estimación y separación de varianzas utilizando ANOVA. Control estadístico de calidad. Ensayos de colaboración. Diagramas de control.

Tema 4. CALIBRACIÓN.

Calibración y el proceso de medida. Operaciones en una calibración. Gráficas de calibración. El coeficiente de correlación momento producto (r). La recta de regresión de y sobre x. Errores en la pendiente y ordenada en el origen de la recta de regresión. Cálculo de la concentración y su error. Límites de detección. El uso de las rectas de regresión para comparar métodos analíticos. Rectas de regresión ponderadas. Regresión curvilínea. Método de adición estándar. Calibración multivariante.

Tema 5. DISEÑO EXPERIMENTAL Y OPTIMIZACIÓN.

Introducción. ANOVA de dos factores. Interacción. Diseños. Tipos. Optimización. Método simplex.

Programa Práctico

1. Análisis exploratorio de los datos 2. Análisis de varianza 3. Calibración 4. Diseño de experimento

Evaluación

Se realizará un examen final. Además, se tendrá en cuenta el trabajo desarrollado en prácticas de laboratorio y los informes elaborados durante el curso. Los alumnos que no hayan superado este examen podrán realizar un examen extraordinario.

Bibliografía

- * J.C. Miller, J.N. Miller: "Estadística y Quimiometría para química analítica". Pearson Educación. Madrid, 2002
 - * Matilde Azaustre... "Estadística Aplicada al Laboratorio". Ed. Ceysa. Barcelona, 2003.
 - * R. Cela: "Avances en quimiometría práctica". Univeridad de Santiago de Compostela. Servicio de Publicaciones e Intercambio Científico. Santiago de Compostela, 1994
-