



# QUÍMICA ANALÍTICA AVANZADA

## Quimiometría

Curso 2008-2009

## QUÍMICA ANALÍTICA AVANZADA

### Curso 2008/09

ASIGNATURA TRONCAL 7 (5+2) CRÉDITOS

Descriptores:

Análisis de trazas, Métodos cinéticos, Automatización, Quimiometría

#### Horario de clases

Grupo A: L-M-X 9-10 horas Aula A4

Grupo B: L-M-X 10-11 horas Aula B4

Las clases son de lunes a miércoles inclusive, excepto las cinco primeras semanas en que se utilizarán también los jueves

#### División del curso

<b>Tópico</b>	<b>Profesor</b>	<b>Duración Grupos A y B</b>
Quimiometría	R. Pardo	28/IX al 13/XI
Análisis de trazas, Met. Cinéticos y Automáticos	J.L. Bernal	17/XI al 23/I

#### Prácticas

Prácticas de ordenador. Se realizarán durante cinco sesiones de dos horas (de 17.00 a 19.00 horas) en el Aula de Informática del Alfonso VIII en el período comprendido entre el 19/XI al 14/XII.

La distribución final dependerá del número de alumnos matriculados, pero en principio habrá tres grupos:

17-21 de noviembre

24-28 de noviembre

1-5 de diciembre

#### Exámenes

Final: 29 de Enero 2009 (Mañana)

Extraordinario: 5 de septiembre 2008 (Mañana)

#### Evaluación

50% Quimiometría + 50% Análisis de Trazas

Quimiometría: 45% Prueba escrita (Debe ser superada)

5% Resolución de ejercicios

## QUÍMICA ANALÍTICA AVANZADA QUIMIOMETRÍA

### Lección 1.- La Quimiometría y el proceso analítico

Introducción.- Definición de Quimiometría.- Quimiometría y Proceso analítico

### Lección 2.- Errores en Química Analítica

Introducción.- Estadística descriptiva.- Medida de la calidad.- Precisión y bias de las medidas.- Otros tipos de error.- Propagación de errores.- Distribución normal.- Teorema del límite central.- Otras distribuciones

### Lección 3.- Precisión y veracidad. Evaluación de datos analíticos

Introducción.- Hipótesis nula y alternativa.- Planteamiento de las pruebas.- Errores de tipo I y II.- Prueba o test de una o dos colas.- Prueba  $\chi^2$  de normalidad.- Resumen de los tests o pruebas de significación: Evaluación de bias de métodos. Comparación de la precisión de métodos diferentes

### Lección 4.- Evaluación de fuentes de variación de los datos. ANOVA

Introducción.- Análisis de varianza de una vía: Estimación de las fuentes de varianza y de su significación.- La tabla del ANOVA.- Modelos de efectos fijos y aleatorios.- Análisis de varianza de dos vías. ANOVA encajados

### Lección 5.- Calibrado y regresión

Introducción.- Método de los mínimos cuadrados.- Estimación de los parámetros.- Validación del modelo.- Heterocedasticidad.- Intervalos de confianza.- Predicciones hechas sobre la línea ajustada.- Detección de outliers.- Otras posibilidades en Química Analítica.- Regresión y correlación

### Lección 6.- Validación de métodos

Introducción.- El proceso y el método analítico.- Calidad y objetivos de la Química Analítica.- Validación del método analítico.- Métodos de validación interna.- Métodos de validación externa

### Bibliografía:

Massart D.L., Vandegintse B.G.M., Buydens L.M.C., De Jong S., Lewi P.J. and Smeyers-Verbeke J., Handbook of Chemometrics and Qualimetrics. Elsevier, Amsterdam, 1997  
Sharaff M.A., Illman D.L. and Kowalski B.R. Chemometrics, Wiley-Interscience, New York, 1986  
Kellner R., Mermet J.M., Otto M. and Widmer H.M. (Eds). Analytical Chemistry, Wiley-VCH, Weinheim, 1998  
Blanco M. y Cerdá V. (Eds). Quimiometría, AEST, Barcelona, 1988  
Ramis G. Y García C., Quimiometría, Editorial Síntesis, Madrid, 2001

Recomendado: Acceso a ordenador personal con EXCEL u hoja de cálculo similar que tenga funciones avanzadas (Estadística básica, pruebas t, F, ANOVA, mínimos cuadrados).

Profesor:

Rafael Pardo Almudí

Despacho 509

e-mail: rpardo@qa.uva.es

El material de apoyo está disponible en Internet:

<http://www.uva.es>

<http://www.geocities.com/quimio2004>