

Estadística. Llicenciatura de Química

Curs 2004–2005

Professora de teoria i responsable: Rosario Delgado

Departament de Matemàtiques

Despatx: C1/360. E-mail: delgado@mat.uab.es

Nota: S'indica la programació temporal prevista aproximada per a un quadrimestre de 14 setmanes, a 3 hores de teoria i 1 hora de problemes a la setmana, tant de teoria (en negreta), com de problemes.

1. Dades i error experimental (2h) (problemes: 1h). Error sistemàtic i error aleatori a les dades experimentals. Precisió i exactitud. Incertesa absoluta i incertesa relativa. El paper dels mètodes estadístics en el tractament de dades experimentals i la necessitat de la Probabilitat. Rudiments d'Estadística Descriptiva per a les dades experimentals.

2. Probabilitat (12h) (problemes: 4h). Probabilitat condicionada i Fórmula de Bayes. Independència d'esdeveniments. Variables aleatòries. La distribució dels errors: la llei Normal o gausiana. Independència de variables aleatòries.

3. Estimació de la incertesa experimental amb intervals de confiança (6h) (problemes: 2h). Les distribucions mostrals. Nivell de confiança i Interval de Confiança per a la mitjana de dades experimentals i per a la variància. Interval per a la proporció.

4. Comparació d'exactituds i precisions de dades experimentals (14h) (problemes: 4h). Introducció als tests d'hipòtesis. Comparació de la mitjana de dades experimentals i de la variància amb un valor conegut. Comparació de mitjanes de dades replicades. Comparació de mitjanes de parells de dades. Comparació de variàncies de dades replicades. Comparacions de proporcions. La normalitat de les dades: el paper probabilístic normal. El test Q de Dixon per a detectar dades anòmales. Els gràfics de control per a la mitjana d'una Normal.

5. Calibrat de procediments de mesura mitjançant la recta de regressió (4h) (problemes: 1.5h). La corba de calibrat i la recta de regressió. Predicció. El coeficient de correlació (de Pearson). Tests d'hipòtesis sobre el coeficient de correlació. Fiabilitat dels paràmetres de la recta de regressió. Fiabilitat de les prediccions. Correcció mitjançant "disolucions blanes".

6. Anàlisi de la variància i disseny d'experiments (4h) (problemes: 1.5h). Importància del disseny d'experiments a les Ciències Experimentals. Disseny completament aleatoritzat: Anàlisi de la variància d'un factor. Dissenys factorials: Anàlisi de la variància pel disseny factorial de dos factors. Efectes principals i interaccions.

BIBLIOGRAFIA

Bennett, C. A. i Franklin, N. L. *Statistical Analysis in Chemistry and the Chemical Industry*, Wiley and sons, 1967.

Delgado, R. *Iniciación a la Probabilidad y la Estadística*, Col·lecció Materials, 153. Servei de Publicacions de la Universitat Autònoma de Barcelona, 2004.

Harris, D. C. *Análisis Químico Cuantitativo*, Segona Edició, Editorial Reverté, 2001.

Miller, J. C. i Miller, J. N. *Estadística para Química Analítica*, Segona Edició. Addison-Wesley, 1993.

AVALUACIÓ I OBJECTIUS

L'avaluació es farà a final de curs amb un examen escrit de tota la matèria. L'objectiu de l'assignatura és el d'introduir les eines estadístiques bàsiques per tal d'analitzar dades provinents d'experiments, incidint sobre la seva correcta utilització i la interpretació dels resultats.