

MESURES ANALÍTQUES I EL SEU TRACTAMENT ESTADÍSTIC

ACTIVITAT 1. EXPRESSIÓ DE LES DADES EXPERIMENTALS

1.1 Mesures i unitats.....	14
1.1.1 Mesura	14
1.1.2 Sistemes d'unitats.....	15
1.2 Xifres significatives.....	18
1.3 Les xifres significatives en les operacions matemàtiques.....	20
1.3.1 Suma i resta	21
1.3.2 Multiplicació i divisió.....	21
1.3.3 Logaritmes i antilogaritmes	21
1.3.4 Criteris per arrodonir	23
1.4 Propagació de la incertesa en els càlculs químics	24
1.4.1 Sumes i restes.....	25
1.4.2 Multiplicacions i divisions	26
1.4.3 Operacions mixtes.....	29
1.4.4 Factor limitant	31
1.5 Exercicis proposats.....	33
1.6 Experiències.....	38
1.6.1 Determinació del contingut en àcid acètic en un vinagre.....	38
1.6.2 Determinació de la densitat en sòlids regulars.....	39

ACTIVITAT 2. AVALUACIÓ DE L'ERROR EXPERIMENTAL

2.1 Conceptes	42
2.2 Teoria dels errors	44
2.2.1 Els errors segons la seva tendència	45
2.2.2 Els errors segons la seva expressió matemàtica	49
2.3 Tractament d'errors.....	51
2.3.1 Paràmetres de centralització.....	51
2.3.2 Paràmetres de dispersió.....	53
2.4 Exercicis proposats.....	58
2.5 Experiència	65
2.5.1 Utilització del full de càlcul com a eina estadística.....	65

ACTIVITAT 3. ANÀLISI DE LA DISTRIBUCIÓ DE LES DADES

3.1 Distribucions	70
3.1.1 Definició	70
3.1.2 Classes.....	71
3.1.3 Classificació de les distribucions.....	77
3.2 La corba normal d'errors	82

3.2.1 Introducció	82
3.2.2 Propietats	83
3.2.3 Càlculs amb la corba normal.....	85
3.2.4 Aspectes importants en l'ús de valors tipificats.....	88
3.3 Exercicis proposats.....	91
3.4 Experiències.....	96
3.4.1 Generació i estudi de distribucions normals amb un full de càlcul.....	96
3.4.2 Estudi de distribucions.....	97

ACTIVITAT 4. TRACTAMENT DE PETITES SÈRIES DE DADES

4.1 Interval de confiança	102
4.1.1 Definicions	102
4.1.2 Intervalls d'incertesa i probabilitat	103
4.1.3 Observacions sobre l'ús de t.....	105
4.2 Valor sospitós	106
4.2.1 Criteri 2,5d	108
4.2.2 Criteri 4d	109
4.2.3 Criteri Q de Dixon	109
4.2.4 Criteri R de Grubbs	110
4.2.5 Criteri 2s	111
4.2.6 Altres criteris de Dixon	112
4.3 Resum.....	113
4.4 Exercicis proposats.....	115
4.5 Experiència	121
4.5.1 Acceptació de valors mitjançant la utilització d'un full de càlcul	121

ACTIVITAT 5. APLICACIÓ DELS TESTS ESTADÍSTICS

5.1 Els tests estadístics	128
5.2 Comparació d'una sèrie de dades amb un valor de referència o amb valor cert	130
5.3 Comparació de les mitjanes aritmètiques de dues sèries.....	133
5.4 Comparació de les precisions de dues sèries	137
5.5 Prova de xi quadrat (χ^2)	138
5.6 Relació entre múltiples variables	140
5.6.1 Relació entre variables.....	140
5.6.2 Taules de contingència.....	141
5.6.3 Distribucions marginals.....	142
5.7 Tractament de dades per a distribucions no paramètriques	145
5.7.1 Criteri de rebuig de dades sospitoses.....	145
5.7.2 Interval que conté el 95% de les dades.....	146
5.7.3 Comparació d'un valor amb una sèrie	147
5.7.4 Comparació entre dues sèries de dades.....	149
5.8 Exercicis proposats.....	151
5.9 Experiència	156
5.9.1 Calibratge d'instrumental volumètric.....	156

ORGANITZACIÓ, TRACTAMENT I PRESENTACIÓ DELS RESULTATS ANALÍTICS

ACTIVITAT 6. AJUST D' EQUACIONS A DADES EXPERIMENTALS

6.1 Relacions lineals i calibratges	160
6.2 Mètode dels mínims quadrats	164
6.2.1 Equacions d'ajust.....	165
6.2.2 Mesura del grau d'ajust.....	167
6.3 Mètode de la mediana simple.....	172
6.3.1 Definició	172
6.3.2 Procediment de càlcul.....	172
6.3.3 Comentaris del mètode.....	176
6.4 Comparació de dos mètodes analítics per regressió lineal	176
6.5 Exercicis proposats.....	181
6.6 Experiències.....	188
6.6.1 Determinació del punt final en una valoració conductimètrica	188
6.6.2 Disseny d'un full de càlcul per a l'estudi del mètode de la mediana simple	192

ACTIVITAT 7. PROCÉS ANALÍTIC I ORGANITZACIÓ DE LA INFORMACIÓ

7.1 Mètodes analítics. Classificació.....	194
7.2 Paràmetres analítics	199
7.2.1 Precisió	201
7.2.2 Exactitud	203
7.2.3 Sensibilitat.....	203
7.2.4 Límit de detecció.....	204
7.2.5 Interval de concentració.....	206
7.2.6 Selectivitat.....	207
7.2.7 Quantitat de mostra	208
7.3 Paràmetres no analítics.....	208
7.3.1 El temps o la velocitat d'anàlisi	208
7.3.2 La robustesa	209
7.3.3 L'ergonomia	209
7.3.4 La formació.....	209
7.3.5 L'economia.....	209
7.3.6 La seguretat laboral i mediambiental	209
7.3.7 El grau de qualitat i fiabilitat dels proveïdors.....	209
7.4 Optimització del mètode	209
7.5 Preparació de la mostra	210
7.6 Organització de la informació.....	211
7.6.1 Bases de dades en la gestió del laboratori	213
7.6.2 Sistemes de gestió de la informació per al laboratori, LIMS.....	217
7.7 Arxius informàtics	218
7.8 Programes de tractament estadístic de dades.....	219
7.9 Tècniques d'elaboració d'informes	221
7.9.1 La llibreta de laboratori.....	221

7.9.2 Els certificats i butlletins d'anàlisi	224
7.10 Exercicis proposats	226
7.11 Experiència	231
7.11.1 Estudi d'un procés analític	231

ACTIVITAT 8. UNITAT D'AVALUACIÓ

Exercicis d'avaluació	233
-----------------------------	-----

9 ANNEX. TAULES

Taula 1 Valors tipificats per a la corba normal	240
Taula 2 Criteris d'acceptació	241
Taula 2.1 Criteris de Dixon	241
Taula 2.2 Valors de la R de Grubbs (parcial)	242
Taula 3 Valors de la t de Student	242
Taula 3.1 Mostra parcial, t de Student	242
Taula 3.2 t de Student. Valors excedits amb la probabilitat p	243
Taula 4 Valors de χ^2	244
Taula 5 Masses atòmiques dels elements	245
Taula 6 Valors de densitat de l'aigua pura, a 760 mm de Hg	246
Taula 7 Incerteses absolutes (toleràncies) del material volumètric	247
Taula 7.1 Buretes i pipetes	247
Taula 7.2 Matrassos aforats i provetes	249
Taula 8 Raó de variància	251
Taula 8.1 Raó de variància, F, per a p = 0,05	251
Taula 8.2 Raó de variància, F, per a p = 0,01	252
Taula 9 Test t de Wilcoxon	253

10 SOLUCIONARI

Exercicis proposats a les activitats	255
--	-----