

Ficha de Unidade Curricular LEQB

Unidade Curricular

Português

Estatística e Quimiometria

Inglês

Statistics and Chemometrics

Total de horas

Teóricas

30

Teórico-práticas

30

Práticas Laboratoriais

0

Docente Responsável

Nome completo

Manuel José de Matos

Nº horas de contacto

Outros Docentes

Nome completo 1

Paulo Ramos

Nome completo 2

Célia Fernandes

Nome completo 3

Ruben Anacoreta de Seabra Elvas Leitão

Nome completo 4

Nelson Alberto Frade da Silva

Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes)

Learning outcomes of the curricular unit

Nesta Uc os estudantes deverão consolidar os seus conhecimentos de estatística e aplica-los na análise química.

Os estudantes deverão ser capazes de:

1. Analisar estatisticamente séries de dados experimentais obtidas em processos analíticos laboratoriais, fabris ou de campo.
2. Eliminar, através dos testes estatísticos, dados aberrantes e comparar conjuntos de dados.
3. Efectuar a propagação de erros associados aos dados analíticos e efectuar regressões e correlações acompanhadas da propagação de erros.
4. Calcular incertezas associadas a procedimentos analíticos seguindo os métodos internacionalmente aceites.
5. Aplicar a conjuntos de dados complexos a análise de variância para comparação das médias.

Dotados das ferramentas estatísticas descritas, os alunos deverão, no final da UC, ser capazes de proceder à validação e reporte de métodos analíticos com base nos procedimentos internacionais de referência.

In this CU students should consolidate their knowledge of statistics and apply them in chemical analysis.

Students should be able to:

1. To statistically analyze series of experimental data obtained in laboratorial, factory or field analytical processes.
2. Eliminate, through statistical tests, aberrant data and compare data sets.
3. To propagate errors associated with analytical data and to perform regressions and correlations accompanied by the propagation of errors.
4. Calculate uncertainties associated with analytical procedures following internationally accepted methods.
5. Apply to complex data sets the analysis of variance for comparison of the means.

Endowed with the statistical tools described, students should, at the end of the CU, be able to carry out the validation and reporting of analytical methods based on international reference procedures.

Conteúdos programáticos

Syllabus

1. Variáveis aleatórias e modelos teóricos unidimensionais
2. Estimação por intervalos
3. Teste de ajustamento. Testes aos outliers
4. Testes de hipóteses paramétricos
5. Correlação e regressão linear
6. Inferência para a regressão
7. Análise de variância
8. Propagação de erros
9. Cálculo de incertezas
10. Validação de métodos

1. Random variables and theoretical one-dimensional models
2. Interval estimation
3. Adjustment test. Tests for outliers
4. Parametric hypothesis testing
5. Correlation and linear regression
6. Inference for regression
7. Analysis of variance
8. Error propagation
9. Uncertainty calculation
10. Method validation

Demonstração da coerência dos conteúdos programáticos com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular *Demonstration of the syllabus coherence with the curricular unit's objectives*

A identificação dos modelos teóricos e cálculo de probabilidades associadas será suportada nos conteúdos do ponto programático: 1. Variáveis aleatórias e modelos teóricos unidimensionais.

A capacidade para seleccionar e analisar conjuntos de dados e comparar conjuntos de dados de ensaios analíticos será suportada nos conteúdos dos pontos programáticos: 2. Estimação por intervalos, 3. Teste de ajustamento. Testes aos outliers e 4. Testes de hipóteses paramétricos.

A propagação de erros em procedimentos e ensaios analíticos bem como a tratamento de dados em termos de regressão e correlação será suportada nos conteúdos dos pontos programáticos: 8. Propagação de erros e 5. Correlação e regressão linear.

O ponto 8 associado ao ponto 9, Cálculo de incertezas, suportarão a capacidade para a realização de cálculos de propagação de incertezas em procedimento de análise e outros ensaios envolvendo a propagação de incertezas.

A análise de variância de conjuntos de dados complexos será suportada nos conteúdos leccionados no ponto programático: 7. Análise de Variância.

A validação de métodos de acordo com os procedimentos internacionalmente aceites será suportada nos conteúdos do ponto programático: 10. Validação de métodos.

The identification of theoretical models studied and the calculation of probabilities associated will be supported in the contents of the programmatic point: Random variables and theoretical one-dimensional models.

The ability to select and analysis data sets and compare data sets of analytical assays will be supported in the contents of the programmatic points: 2. Interval estimation, 3. Adjustment test. Tests for outliers and 4. Parametric hypothesis testing.

The propagation of errors in procedures and analytical tests as well as the treatment of data in terms of regression and correlation will be supported in the contents of: 8. Error propagation, 5. Correlation and linear regression.

Point 8 associated with point 9, Uncertainty calculation, will support the ability to carry out uncertainty propagation calculations in the analysis procedure and other tests involving the propagation of uncertainties.

The analysis of variance of complex data sets will be supported in the contents taught in section 7. Analysis of variance.

The validation of methods according to internationally accepted procedures will be supported in the contents of

point 10. Validation of methods."

Metodologias de ensino (avaliação incluída)
Teaching methodologies (including evaluation)

Os conteúdos base da UC serão transmitidos por leccionação em modo expositivo suportadas informaticamente. As aulas serão aplicadas e interactivas.
Dos conceitos transmitidos, serão dados exemplos reais de dados experimentais. Os alunos poderão aplicar nos dados os métodos leccionados.
O ensino das ferramentas estatísticas será concretizado através de exemplos a serem tratados pelos alunos nas suas máquinas de calcular, tablets e computadores. Será privilegiada a utilização de folhas de cálculo e programas específicos como o SPSS ou R.
A avaliação será efectuada através de avaliação em aula e através de exercícios que os alunos deverão resolver periodicamente (componente prática=30%). Será também realizado um teste final global (70%).
Os alunos que falharem a avaliação ao longo do semestre terão acesso ao exames finais.
Não será possível obter aprovação na UC sem aprovação na componente prática.

The basic contents of the UC will be transmitted by lecturing in expository mode supported by computer. The classes will be applied and interactive.
From the concepts conveyed, real examples of experimental data will be given. Students will be able to apply the taught methods to the data.
The teaching of statistical tools will be accomplished through examples to be dealt with by students on their calculators, tablets and computers. The use of spreadsheets and specific programs such as SPSS or R.
The evaluation will be done through assessment in class and through exercises that the students must solve periodically (practical component = 30%). An overall final test (70%) will also be performed.
Students who fail the assessment throughout the semester will have access to final exams.
It will not be possible to obtain approval in the CU without approval in the practical component.

Demonstração da coerência das metodologias de ensino com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular

Demonstration of the coherence between the teaching methodologies and the learning outcomes

As matérias teóricas serão expostas aos alunos sempre suportadas em exemplos demonstrativos reais. Será também dinamizada a reflexão crítica dos alunos de modo a que se apropriem e interiorizem os conceitos leccionados.
Considerando que os objetivos desta UC contemplam uma componente prática importante, as metodologias são suportadas em abordagens também iminentemente práticas e de execução pelos próprios alunos. Será priorizada a execução de exercícios com dados reais que sejam representativos da aplicação da quimiometria nas atividades de um Engenheiro Químico.
A resolução de problemas reais será executada com suporte a meios informáticos com o objetivo de simular a atividade real que os alunos encontrarão nas suas atividades profissionais.
Os problemas apresentados irão aumentar de complexidade ao longo do semestre para que no final os alunos estejam perante a resolução de casos reais, ou seja concretos e completos.

The theoretical subjects will be exposed to the students always supported in real demonstrative examples. The critical reflection of the students will also be stimulated in order to appropriate and internalize the concepts taught.
Considering that the objectives of this CU include an important practical component, the methodologies are supported in approaches also imminently practical and of execution by the students themselves.
Priority will be given to the execution of exercises with real data that are representative of the application of chemometrics in the activities of a Chemical Engineer.
The resolution of real problems will be carried out with support to computer means with the aim of simulating the real activity that the students will find in their professional activities.
The problems presented will increase in complexity during the semester so that in the end students are faced with the resolution of real cases, that is, concrete and complete.

Bibliografia Principal

Main Bibliography

1. D. Montgomery, "Applied Statistics and Probability for Engineers", 5th Ed., Wiley, 2010.
2. James Miller, Jane Miller, "Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry", 6th Ed., Pearson Education, 2010.
3. D. Massart, B. Vandeginste, S. Deming, Y. Michotte, L. Kaufman, "Chemometrics: a textbook" Elsevier, 2003.
4. Guide to Quality in Analytical Chemistry, CITAC and EURACHEM, 2002.
5. R. Brereton, "Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant", John Wiley & Sons, 2003
6. D. Livingstone, "Practical Guide to Scientific Data Analysis", John Wiley & Sons, 2009
7. P. Meier, R. Zund, "Statistical Methods in Analytical Chemistry", John Wiley & Sons, 1993
8. "The Fitness for Purpose of Analytical Methods: A Laboratory Guide to Method Validation and Related Topics" 2nd edition, Eurachem - Method Validation Working Group, 2014.
9. F. Holler, S. Crouch, "Applications of Microsoft® Excel in Analytical Chemistry", 2nd Edition, Brooks Cole, 2013.