

Química Analítica

Aula 3

Erros e Estatística

Prof. Jan Schripsema

(jan@uenf.br)

29-Mar-21

1



Grupo Metabolômica



Tipos de erro de laboratório

Existem dois tipos de erro que podem ocorrer em uma medição:

- **Erro sistemático**, representado por um viés constante entre os resultados encontrados e a verdadeira resposta.
- **Erro aleatório**, esse tipo de incerteza resulta de variações aleatórias em dados experimentais. Eles estão presentes em todas as medições, e são decorrentes de fatores como variações na leitura de instrumentos e condições experimentais que fogem ao controle.

Erros Aleatórios e Sistemáticos - Bioestatística #6

https://www.youtube.com/watch?v=I_8CkR2wyrQ



Exatidão e precisão

- **Exatidão** é usada em ciências para descrever a diferença entre um resultado experimental e seu valor verdadeiro.
- **Precisão** se refere à variação nos resultados obtidos em condições semelhantes.
- Dois termos usados para descrever a exatidão são:
 - ✓ *erro absoluto* e
 - ✓ *erro relativo*.



Exatidão e precisão

- O **erro absoluto** (e) de um resultado experimental (x) é encontrado pelo cálculo da diferença entre esse resultado e seu valor real (μ).

$$e = x - \mu$$

- O **erro relativo** (e_r) é calculado encontrando-se a diferença entre os valores reais e medidos e dividindo-se essa diferença pela resposta verdadeira.

$$e_r = \frac{x - \mu}{\mu}$$



Exatidão e precisão

Determinação do valor mais representativo

- Como os erros aleatórios estão presentes em qualquer medição, devemos, então, determinar a melhor forma de representar nossa resposta final. Essa tarefa é geralmente executada por meio da **média aritmética** (\bar{x} , também conhecida como mediana ou média), que é calculada conforme demonstrado a seguir.

$$\bar{X} = \frac{(X_1 + X_2 + \dots + X_n)}{n} = \frac{\sum (X_i)}{n}$$



Desvio padrão

Relatório de variações em um conjunto de resultados

- Um meio mais consistente de descrever a variação em um grupo de resultados é o uso do **desvio-padrão (s)**. Esse desvio é calculado por meio da equação abaixo, em que cada valor do conjunto (x_1 a x_n para n valores) é comparado com a média (\bar{x}) desse mesmo grupo de números.

$$s = \sqrt{\frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{n - 1}}$$



Desvio padrão

Relatório de variações em um conjunto de resultados

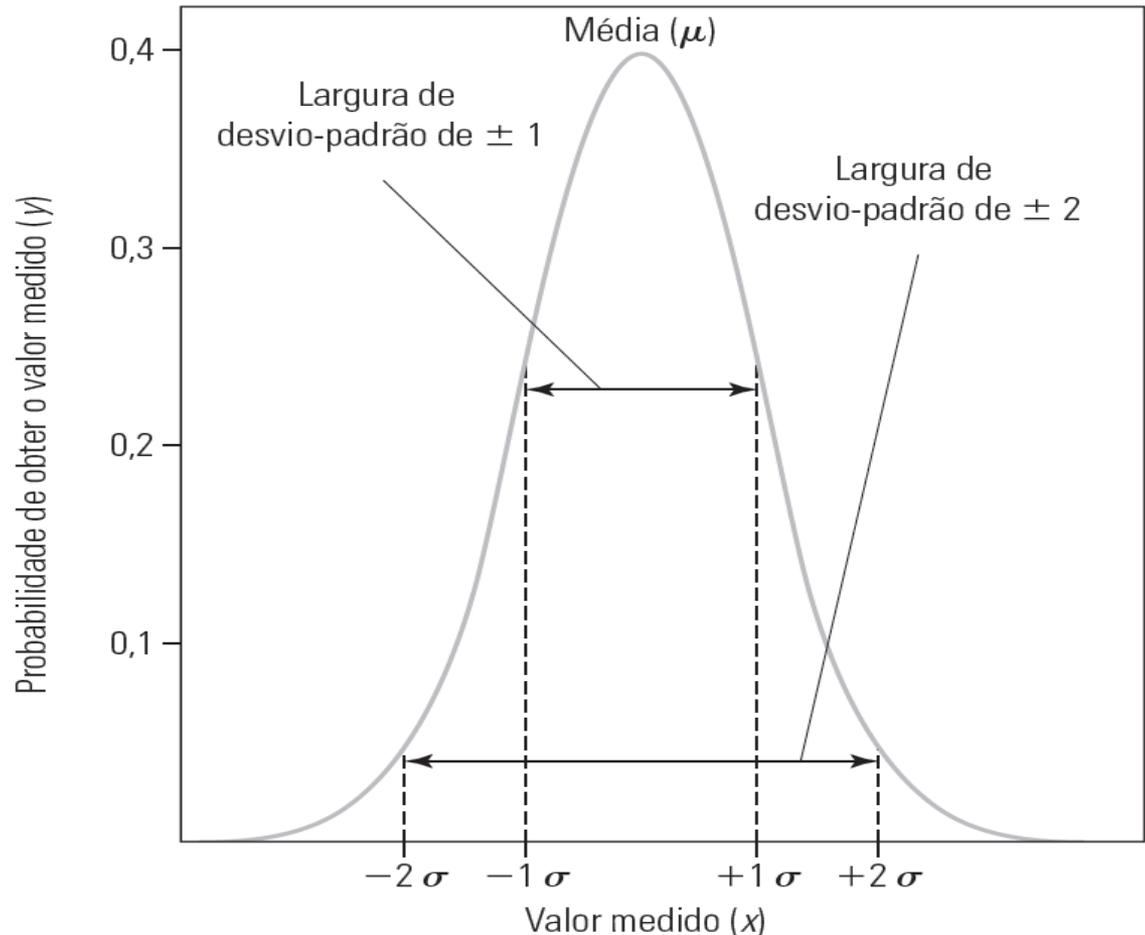
- Dois parâmetros relacionados com o desvio-padrão são a *variância* (V) e o *desvio-padrão relativo* (RSD). Este é também chamado de *coeficiente de variação* (CV), e é encontrado tomando-se o desvio-padrão de um grupo de resultados e dividindo-o pela média dos mesmos dados, em que $RSD = s/x$ ou $RSD (\%) = 100 \cdot (s/x)$.
- A variância é simplesmente igual ao quadrado do desvio-padrão, ou $V = (s)^2$, e é importante na descrição da propagação de erros experimentais.



Desvio padrão

Descrição da variação em grandes conjuntos de dados

- Se fôssemos fazer a mesma medição muitas vezes e plotar o número de vezes em que obtivéssemos um determinado valor, teríamos um resultado semelhante ao do gráfico na figura ao lado:



Distribuição normal (Gauss)

Descrição da variação em grandes conjuntos de dados

- Se tomarmos medidas suficientes e tivermos a mesma probabilidade de obter tanto variações altas quanto baixas em um resultado, o gráfico produzido terá uma 'forma de sino', com o centro ocorrendo na média de nosso conjunto de dados. Isso é conhecido como **distribuição normal** ou *distribuição de Gauss*

Distribuição Normal - Bioestatística #4

https://www.youtube.com/watch?v=FZDbJG_qXyw

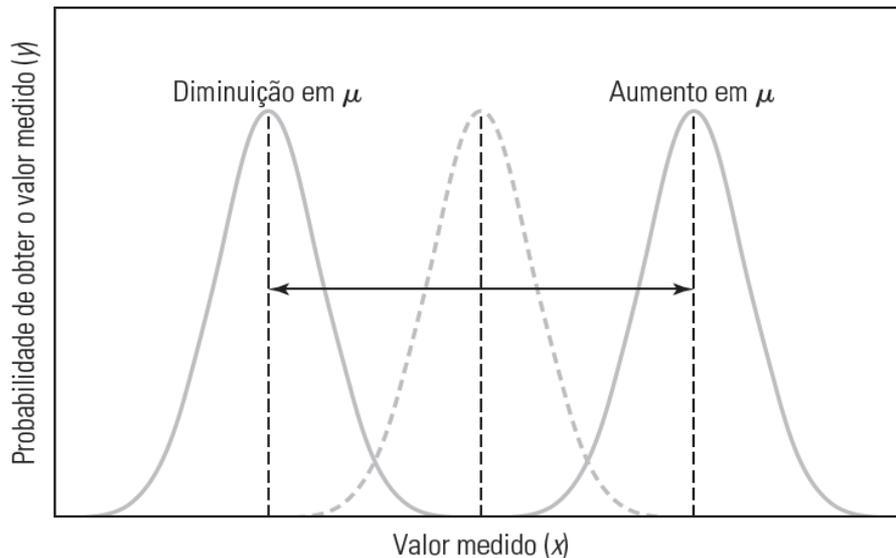


Distribuição normal (Gauss)

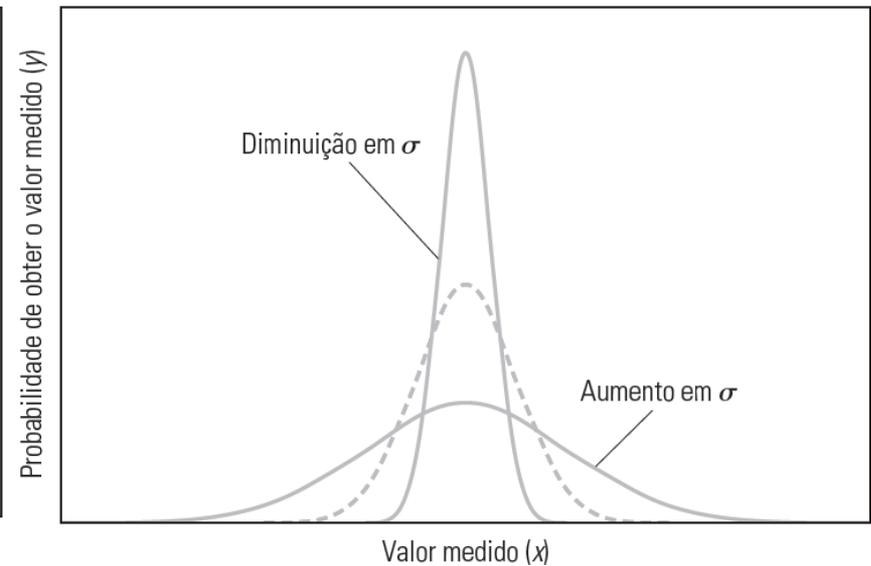
Descrição da variação em grandes conjuntos de dados

- Uma alteração na média ou no desvio-padrão afetará a forma de uma curva de distribuição normal:

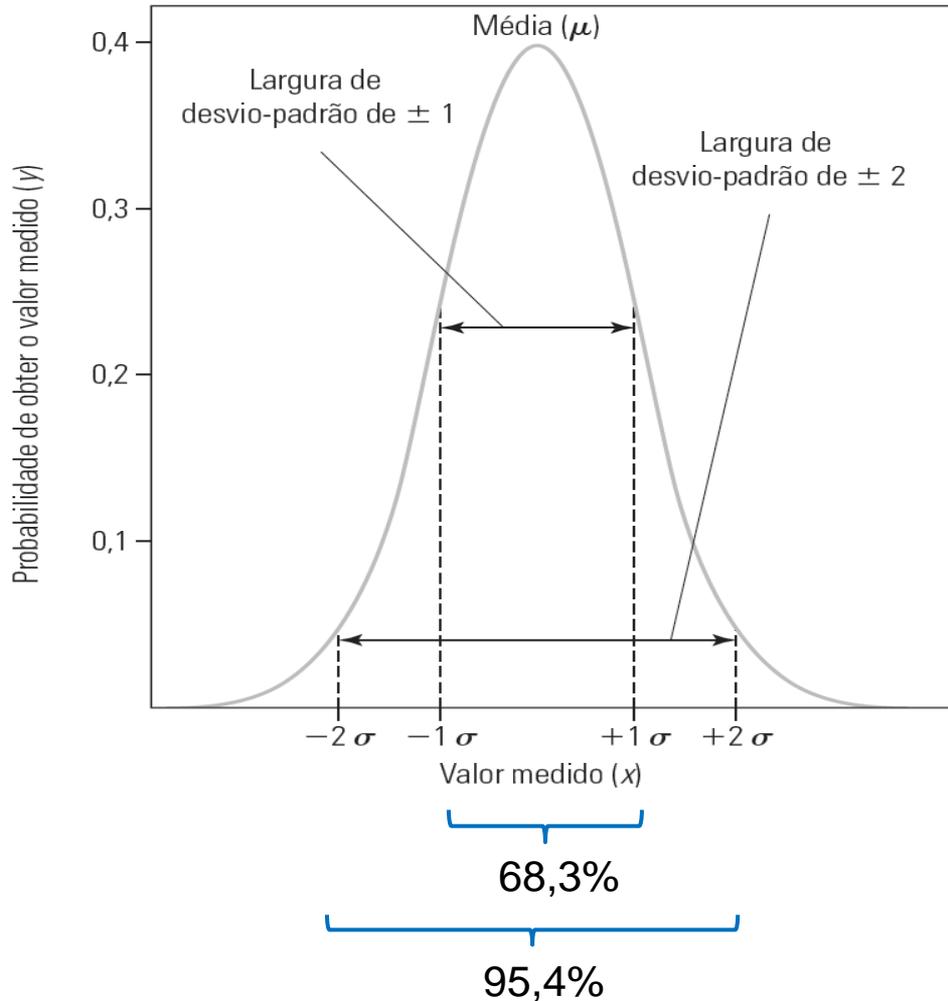
Efeito da mudança na média (μ)



Efeito da mudança no desvio-padrão real (σ)



Distribuição normal (Gauss)



Distância da média (z)	Área relativa da média para z
0,0	0,0000
0,2	0,0793
0,4	0,1554
0,6	0,2258
0,8	0,2881
1,0	0,3413
1,2	0,3849
1,4	0,4032
1,6	0,4192
1,8	0,4641
2,0	0,4772
2,2	0,4861
2,4	0,4981
2,6	0,4953
2,8	0,4974
3,0	0,4987

$$z = (x - \mu) / \sigma$$



Requisitos gerais para a comparação de dados

Há quatro itens básicos de que você precisa quando utiliza estatísticas para comparar resultados experimentais. Esses itens (mostrados na figura a seguir) incluem:

- um modelo,
- uma hipótese,
- um nível de confiança e
- uma estatística de teste.

**O que são Testes de Hipótese? -
Bioestatística #9**

<https://www.youtube.com/watch?v=FZHqrVyc104>



Requisitos gerais para a comparação de dados

O modelo

Com o que meu resultado está sendo comparado?

A hipótese

Qual é o resultado esperado dessa comparação?

O nível de confiança

Que grau de certeza almejo para essa comparação?

A estatística de teste

Como devo comparar meu resultado e meu modelo?



Comparação de um resultado experimental a um valor de referência

- Esse tipo de comparação pode ser necessário, por exemplo, ao determinarmos a exatidão de um novo método.
- Se o valor de referência for conhecido com exatidão, podemos usar esse valor para representar a 'média' real da amostra, μ .
- Para comparar esse valor com o resultado médio medido da amostra (\bar{x}), podemos usar o valor t de Student como estatística de teste.



Valor t de Student

VOLUME VI

MARCH, 1908

No. 1

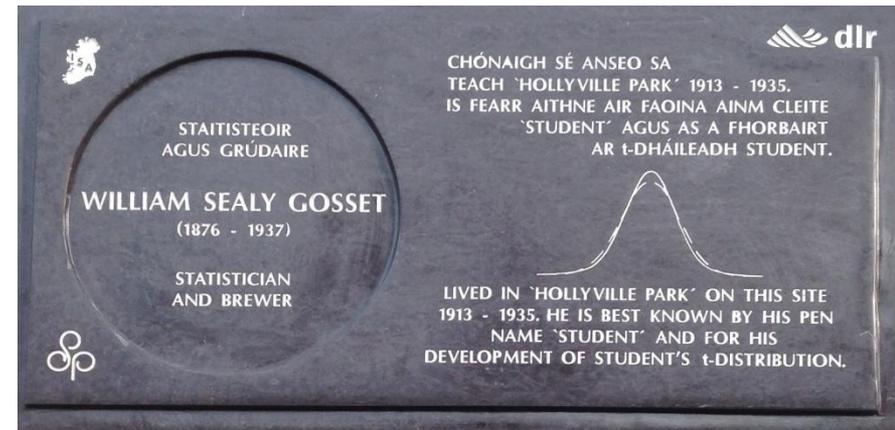
BIOMETRIKA.

THE PROBABLE ERROR OF A MEAN.

By STUDENT.

Introduction.

ANY experiment may be regarded as forming an individual of a "population" of experiments which might be performed under the same conditions. A series of experiments is a sample drawn from this population.



What is a t-test?

<https://www.youtube.com/watch?v=N2dYGnZ70X0>

29-Mar-21

15



Grupo Metabolômica



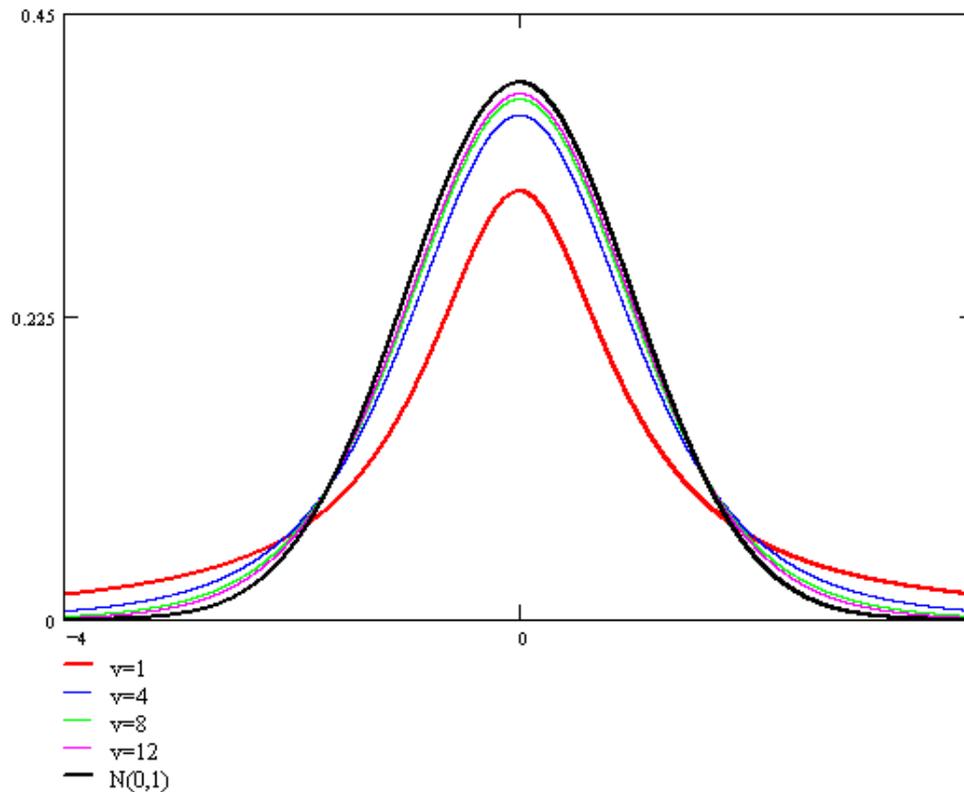
Comparação de um resultado experimental a um valor de referência

- O resultado é um método estatístico conhecido como **teste t de Student**.
- Você poderá testar essa hipótese calculando um valor t de Student conforme mostrado a seguir,

$$t = \frac{|\bar{X} - \mu|}{S_{\bar{X}}}$$



Distribuição t de Student



#08 - Distribuição t-Student - Conceitos e Tabela
https://www.youtube.com/watch?v=y_-UOcQMpms



Distribuição t de Student

Exemplo

Um fabricante de aparelhos celulares afirma que a duração média de sua bateria nos primeiros 6 meses de uso é de 120 horas, ou seja, 5 dias. Analisando uma amostra de 25 aparelhos, obteve-se uma média de duração de 116 horas, com desvio padrão de 12 horas. Verifique se a afirmação é verdadeira, utilizando um nível de confiança de 95% bicaudal.

Resolução:

1º Utilizando a tabela de distribuição t student, definem-se os pontos críticos através do grau de liberdade (24) e o nível de confiança (95%).

Nesse caso, os pontos críticos são $\pm 2,064$, ou seja, $P(-2,064 < t < 2,064)$. Se o valor de t estiver dentro desses limites a afirmação é verdadeira.

2º Na sequência calcula-se o valor de t para a amostra:

Dados:

$$\bar{X} = 116;$$

$$\mu = 120;$$

$$S = 12;$$

$$n = 25;$$

$$\text{Fórmula: } t = \frac{\bar{X} - \mu}{S/\sqrt{n}} = \frac{116 - 120}{12/\sqrt{25}} = -1,667$$

3º Conclusão: Como $t = -1,667$, encontra-se dentro dos limites críticos, $P(-2,064 < t < 2,064)$, a afirmação do fabricante de celular que a duração média da sua bateria é de 120 horas, a um nível de confiança de 95%, é verdadeira.

Fonte: https://pt.wikipedia.org/wiki/Distribui%C3%A7%C3%A3o_t_de_Student



Distribuição t de Student

<i>Unicaudal</i>	75%	80%	85%	90%	95%	97,5%	99%	99,5%	99,75%	99,9%	99,95%
<i>Bicaudal</i>	50%	60%	70%	80%	90%	95%	98%	99%	99,5%	99,8%	99,9%
1	1,000	1,376	1,963	3,078	6,314	12,71	31,82	63,66	127,3	318,3	636,6
2	0,816	1,061	1,386	1,886	2,920	4,303	6,965	9,925	14,09	22,33	31,60
3	0,765	0,978	1,250	1,638	2,353	3,182	4,541	5,841	7,453	10,21	12,92
4	0,741	0,941	1,190	1,533	2,132	2,776	3,747	4,604	5,598	7,173	8,610

20	0,687	0,860	1,064	1,325	1,725	2,086	2,528	2,845	3,153	3,552	3,850
21	0,686	0,859	1,063	1,323	1,721	2,080	2,518	2,831	3,135	3,527	3,819
22	0,686	0,858	1,061	1,321	1,717	2,074	2,508	2,819	3,119	3,505	3,792
23	0,685	0,858	1,060	1,319	1,714	2,069	2,500	2,807	3,104	3,485	3,767
24	0,685	0,857	1,059	1,318	1,711	2,064	2,492	2,797	3,091	3,467	3,745
25	0,684	0,856	1,058	1,316	1,708	2,060	2,485	2,787	3,078	3,450	3,725



Ajuste de resultados experimentais

- Existem muitos tipos de equação utilizados em análise química, mas o mais comum é o de uma linha reta.

Regressão linear

- A regressão linear envolve tomar um conjunto de valores (x , y) e ajustá-los a uma equação com a seguinte forma,

$$y_{i,\text{calc}} = m x_i + b$$

- É possível obter as melhores estimativas para m e b usando-se o método de *análise de mínimos quadrados*.



Regressão linear

- Esse método fornece uma série de equações

Regressão Linear simples e descomplicada!!!

<https://www.youtube.com/watch?v=fgNGtzJvSdl>

Inclinação (m)

$$m = \frac{[n(\sum x_i y_i) - (\sum x_i)(\sum y_i)]}{[n(\sum x_i^2) - (\sum x_i)^2]} \quad (4.28)$$

Intercepto (b)

$$b = \frac{[(\sum y_i)(\sum x_i^2) - (\sum x_i y_i)(\sum x_i)]}{[n(\sum x_i^2) - (\sum x_i)^2]} \quad (4.29)$$

Desvio-padrão de todos os valores y (s_y)

$$s_y = [\sum (y_i - m x_i - b)^2 / (n - 2)]^{1/2} \quad (4.30)$$

Desvio-padrão da inclinação (s_m)

$$s_m = (n/[n(\sum x_i^2) - (\sum x_i)^2])^{1/2} (s_y) \quad (4.31)$$

Desvio-padrão do intercepto (s_b)

$$s_b = ((\sum x_i^2)/[n(\sum x_i^2) - (\sum x_i)^2])^{1/2} (s_y) \quad (4.32)$$

Coefficiente de correlação (r)

$$r = s_{xy} / \sqrt{s_{xx} s_{yy}} \quad (4.33)$$

onde:

$$s_{xx} = (\sum x_i^2) - [(\sum x_i)^2/n] \quad (4.34)$$

$$s_{yy} = (\sum y_i^2) - [(\sum y_i)^2/n] \quad (4.35)$$

$$s_{xy} = (\sum x_i y_i) - [(\sum x_i)(\sum y_i)/n] \quad (4.36)$$



Regressão linear

Essas equações só fornecerão resultados válidos se seu conjunto de dados atender a três requisitos básicos:

1. Supõe-se que a variável independente (x) seja conhecida e que somente a variável dependente (y) contenha erros aleatórios significativos.
2. Supõe-se que a variação entre os valores y seja realmente aleatória e tenha um tipo consistente de distribuição.
3. Supõe-se que a variabilidade para y seja a mesma em toda a faixa de valores de x sendo correlacionados com a linha.



Teste do grau de adequação

- Após obter uma regressão linear, é essencial verificar esse ajuste para se certificar de que a linha realmente fornece uma boa descrição dos dados.
- Esse processo é conhecido como determinação do 'grau de adequação' da linha.
- Duas ferramentas que auxiliam nesse processo são o *coeficiente de correlação* e o *gráfico residual*.



Teste do grau de adequação

- O **coeficiente de correlação** (r) é um número que se pode calcular para uma regressão linear de modo a indicar como ele descreve seus dados.
- O coeficiente de correlação é encontrado por meio das equações 4.33 a 4.36 na tabela anterior e produzirá um valor entre -1 e 1.
- Um termo estreitamente relacionado é o *coeficiente de determinação* (r^2), que é igual ao quadrado do coeficiente de correlação e tem valor entre 0 e 1.



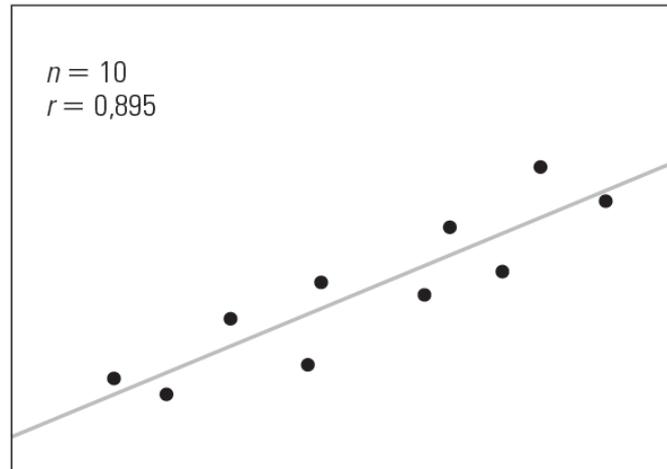
Teste do grau de adequação

- A figura a seguir mostra como o coeficiente de correlação muda conforme o tamanho de um conjunto de dados e a concordância desse conjunto com uma regressão linear.
- Devido à presença de erros aleatórios, quase nunca se obtém um coeficiente de correlação que seja exatamente igual a 0, -1 ou 1. Em vez disso, é comum se obter algum valor situado entre esses extremos.

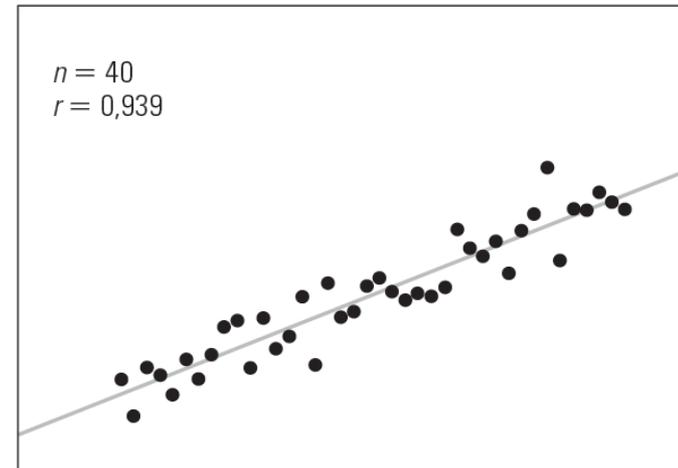
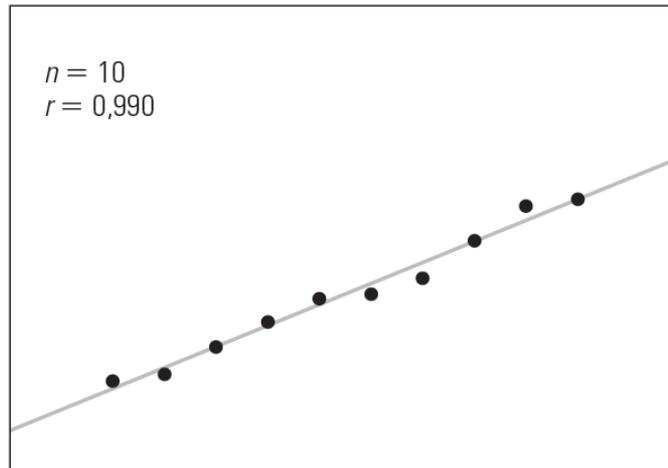


Teste do grau de adequação

Aumentar precisão
de dados



Aumentar quantidade
de dados



Teste do grau de adequação

- **Gráficos residuais.** É preparado traçando-se a diferença, ou residual, entre cada valor experimental para a variável dependente (y_i) e o valor previsto pela regressão linear ($y_{i,calc}$).
- Se a regressão linear descrever bem os seus dados, o gráfico residual deverá ter somente uma distribuição aleatória de pontos acima e abaixo da linha em $(y_i - y_{i,calc}) = 0$. Se a regressão linear não descrever os dados, uma tendência nos pontos residuais deverá aparecer em vez disso, sinalizando que um ajuste alternativo é necessário.



Caracterização e validação de método

- Para ajudar na escolha de um método analítico, você precisa estar familiarizado com as propriedades utilizadas para caracterizar tais técnicas. Essas propriedades são conhecidas como *figuras de mérito* do método, e incluem aspectos como exatidão, precisão e intervalo utilizável do ensaio.
- O processo de caracterização de uma técnica analítica e prova de que ela cumprirá os propósitos a que se destina é conhecido como **validação de método**.



Caracterização e validação de método

Exatidão e precisão

- **Recuperação de contaminante e estudos de correlação.** Um **estudo de recuperação de contaminante** pode ser usado para avaliar a exatidão de um método analítico quando se está trabalhando com um analito ou uma amostra para os quais não exista bom material de referência disponível.
- A diferença entre valores é comparada com a quantidade adicionada à amostra contaminada. Esse processo permite que a recuperação percentual, que é uma medição da exatidão do método, seja calculada.



Caracterização e validação de método

Exatidão e precisão

- Quanto mais próxima de 100 por cento for essa recuperação, mais exata será a medição.

Recuperação percentual = 100 ·

$$\frac{\text{(Mudança na quantidade de analito medido)}}{\text{(Quantidade de analito contaminante na amostra)}}$$



Caracterização e validação de método

Exatidão e precisão

- Outro meio de avaliar a exatidão é tomar um grupo de várias amostras e medir a quantidade de analito em cada uma, usando tanto o seu método quanto uma segunda técnica, mais estabelecida. Essa abordagem é conhecida como *estudo de correlação*.
- Uma segunda abordagem consiste em usar um **gráfico de correlação**. Trata-se de um gráfico em que os resultados de seu novo método são plotados em contraste com os da técnica de referência.



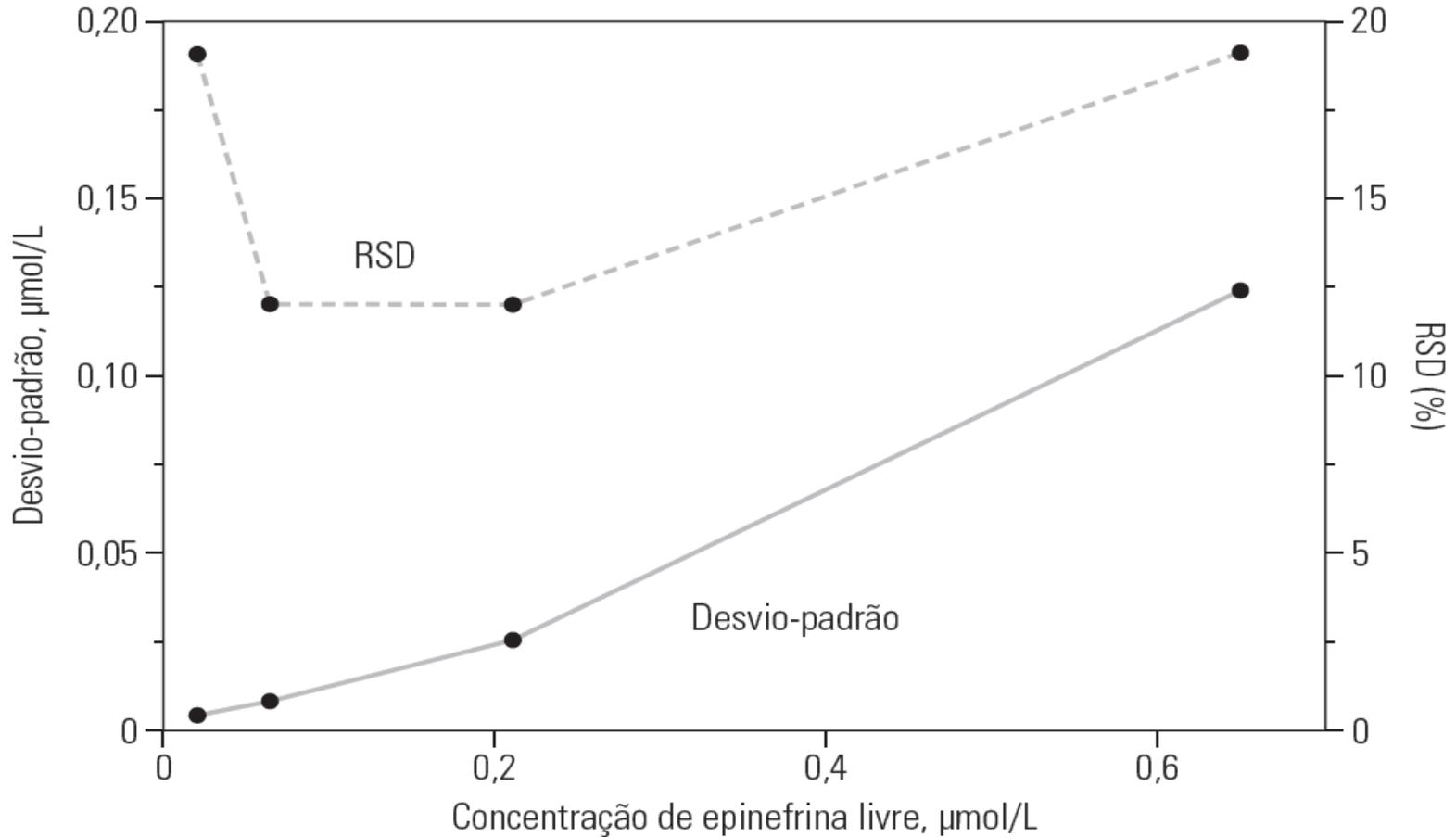
Caracterização e validação de método

Exatidão e precisão

- **Medições de precisão.** A precisão de uma técnica analítica pode ser examinada por meio da análise de várias porções da mesma amostra de referência.
- Esse efeito é ilustrado na figura a seguir por meio de um diagrama conhecido como **gráfico de precisão**. O propósito de um gráfico de precisão é fornecer uma representação visual de como a precisão de um método muda conforme a propriedade ou a quantidade medida de um analito varia.



Caracterização e validação de método



Caracterização e validação de método

Exatidão e precisão

- Assim como existem muitos fatores que podem influenciar o desempenho de um método analítico, também são muitas as maneiras de descrever como esses fatores afetam a reprodutibilidade da técnica.
- Um resumo dos termos usados com esse propósito é fornecido na tabela a seguir.



Caracterização e validação de método

Tipos de precisão	Propriedade medida
Repetibilidade	Variação obtida para a mesma amostra durante uma única série de um ensaio.
Precisão intradia	Variação obtida durante um único dia, geralmente no decorrer de várias séries.
Precisão dia a dia	Variação obtida ao longo de dias.
Precisão interoperador	Variação obtida por meio de um único método e amostra, mas por diferentes analistas.
Precisão interlaboratorial	Variação obtida por um único método e amostra, mas por diferentes laboratórios.



Caracterização e validação de método

Resposta de ensaio

- A resposta é descrita por meio da utilização de parâmetros como limite de detecção, intervalo e sensibilidade ou seletividade.
- **Limites de detecção.** O valor mais alto ou o mais baixo de analito que pode ser detectado por um método analítico é descrito usando-se **um limite de detecção (LOD)**.
- O *limite superior de detecção* é a maior quantidade de analito que pode ser medida por um método com confiança.



Caracterização e validação de método

Resposta de ensaio

- O *limite inferior de detecção* se refere à menor quantidade de analito que pode ser medida com confiança.
- O limite inferior de detecção é muitas vezes determinado pela comparação da variação na resposta de um método em uma *amostra em branco* com a resposta observada em materiais conhecidos por conter pequenas quantidades de analito.
- Essa comparação é feita por meio do cálculo da **relação sinal/ruído (S/N)**.



Caracterização e validação de método

Resposta de ensaio

- Muitos laboratórios de testes de drogas usam S/N de **3,3:1**, conforme mostrado na seguinte equação.

$$\text{LOD} = 3,3 (s_b/m)$$

- Essa equação permite estimar o limite inferior de detecção utilizando a regressão linear em uma curva de calibração linear.



Caracterização e validação de método

Resposta de ensaio

- Um parâmetro semelhante usado para descrever a resposta de um método é chamado de **limite de quantificação (LOQ)**.
- O LOQ representa a menor ou a maior quantidade de analito que pode ser medida em um determinado intervalo de exatidão e/ou precisão.



Caracterização e validação de método

Resposta de ensaio

- Além de usar um gráfico de precisão, você pode determinar o LOQ do método por meio de uma relação sinal/ruído. Essa determinação é realizada da mesma forma que a descrita para o LOD, exceto que uma S/N de 10:1 é usada agora como o valor de corte.

$$\text{LOQ} = 10 (s_b/m)$$

- **Faixa e linearidade de ensaio.** A 'faixa' de um método analítico está intimamente relacionada com o limite de detecção.



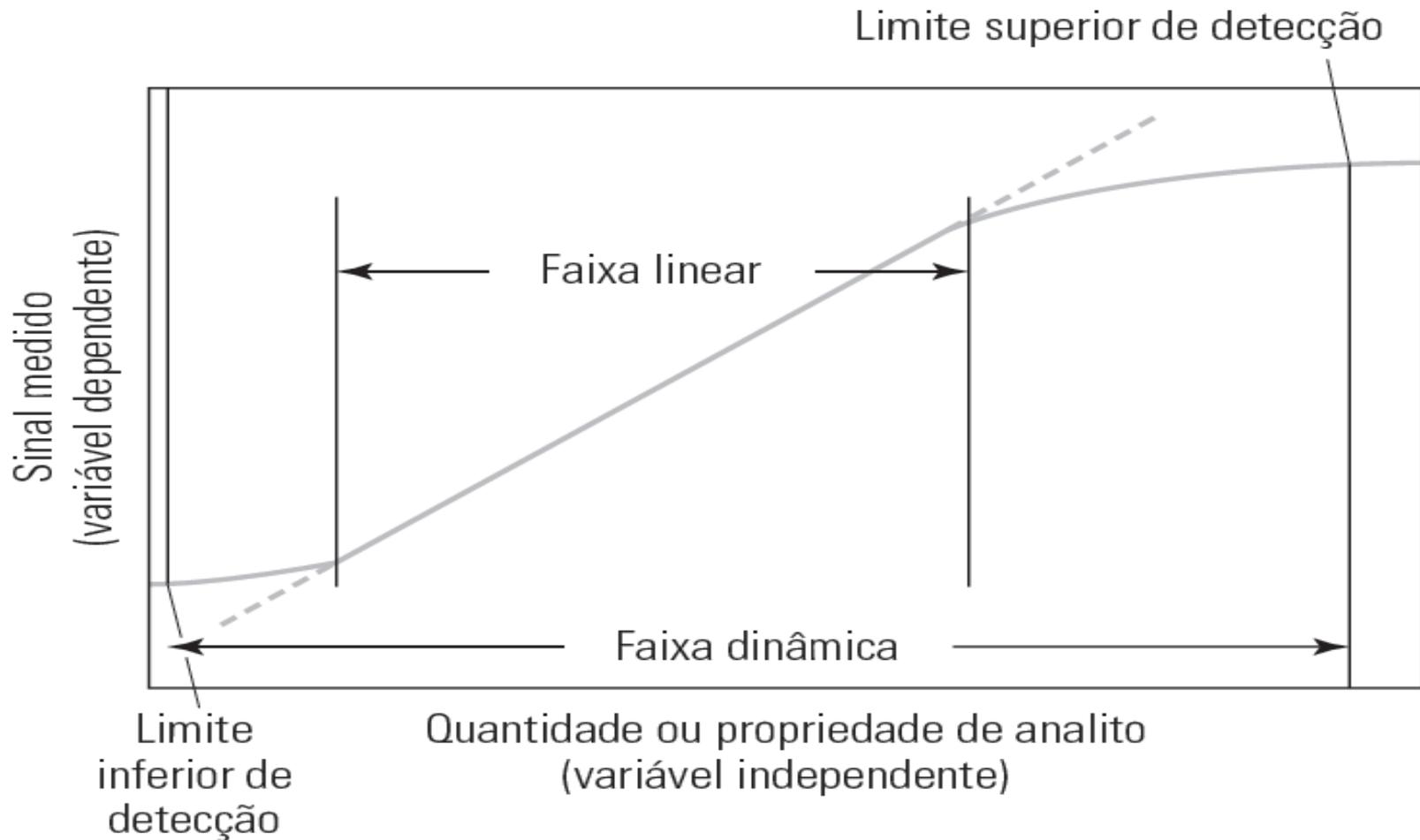
Caracterização e validação de método

Resposta de ensaio

- Ela se refere a todo o conjunto de concentrações do analito ou propriedades da amostra que se enquadram dentro dos níveis desejados de precisão e exatidão de um método analítico.
- A faixa mais ampla possível de ser usada com uma técnica analítica se estende desde o limite inferior de detecção ao limite superior de detecção (figura a seguir), e é conhecida como **faixa dinâmica**.



Caracterização e validação de método



Caracterização e validação de método

Resposta de ensaio

- A faixa dinâmica pode ser dividida em áreas menores que representem tipos específicos de resposta.
- Uma dessas áreas é **a faixa linear**, a parte da faixa de um método que dá uma relação linear entre a resposta e a quantidade de um analito ou a propriedade medida.
- **Sensibilidade e especificidade.** A **sensibilidade** de um método trata-se da medida de como a resposta muda à medida que a quantidade de analito ou a propriedade da amostra varia.



Caracterização e validação de método

Resposta de ensaio

- A forma mais comum de descrever a sensibilidade de um método é usar a inclinação da curva de calibração. Essa abordagem resulta em um parâmetro conhecido como *calibração da sensibilidade*.
- O limite inferior de detecção se refere à menor quantidade de analito que pode ser examinado por um método, enquanto a sensibilidade se refere à menor *variação* na quantidade de analito que pode ser detectada.



Caracterização e validação de método

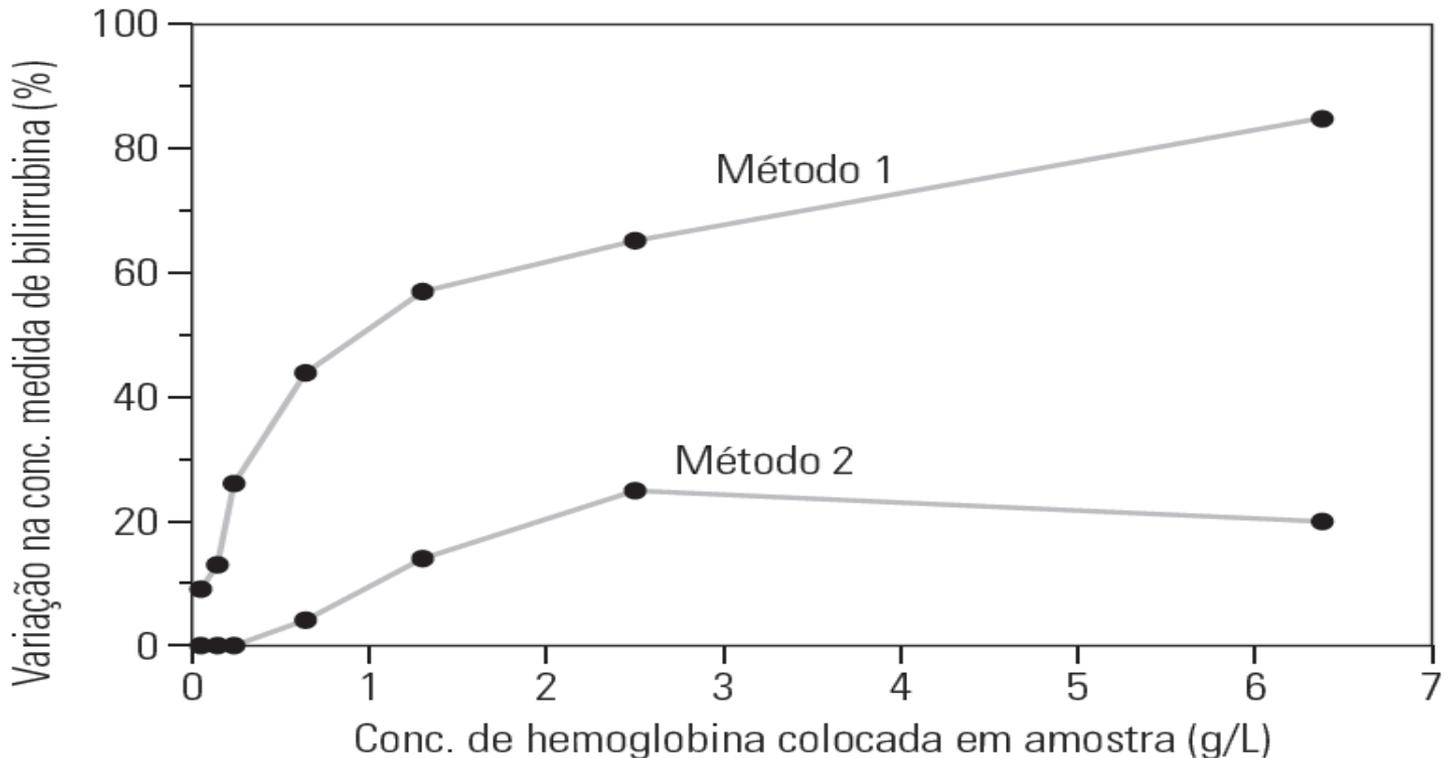
Resposta de ensaio

- A **especificidade** se refere à capacidade de um método analítico de detectar e discriminar entre o analito e outras substâncias químicas em uma amostra.
- O termo *seletividade* também é usado para descrever essa propriedade.
- Uma técnica analítica é considerada ‘específica’ ou ‘seletiva’ se responde a um único analito ou a um pequeno grupo de substâncias.



Caracterização e validação de método

- Uma forma de avaliar a especificidade de um método é usar um **gráfico de interferência**.



Caracterização e validação de método

Resposta de ensaio

- Tal gráfico torna possível determinar se o agente adicionado criará quaisquer problemas no ensaio.
- Outra abordagem da descrição da especificidade de um método analítico é a utilização de um *coeficiente de seletividade*.
- Esse coeficiente é uma razão que compara os sinais produzidos por uma substância com outra após a aplicação do mesmo método.



Caracterização e validação de método

Outras propriedades de métodos analíticos

- Um fator a ser considerado é o *tempo de análise global* do método, que é o tempo de que todas as etapas da elaboração e análise de uma amostra necessitam.
- Alguns métodos requerem que uma substância química esteja na fase gasosa antes que possa ser medida, enquanto outros podem exigir um líquido ou um sólido.
- Outros pontos que devemos considerar durante a escolha do método são custo, disponibilidade e facilidade de uso de uma técnica.



Controle de qualidade

- O processo de monitoramento do desempenho rotineiro de um método analítico é conhecido como **controle de qualidade**.

Requisitos gerais para o controle de qualidade

Há três itens que são usados em qualquer processo de controle de qualidade.

- **Material de controle** (ou 'controle'). Trata-se de uma substância a ser analisada periodicamente por um método analítico para determinar se o procedimento está funcionando de maneira consistente.



Controle de qualidade

Requisitos gerais para o controle de qualidade

- **Gráfico de controle.** Esse gráfico utiliza os resultados obtidos a partir de um material de controle para acompanhar o desempenho de um método analítico ao longo do tempo.
- **Avaliação de erro.** Trata-se do processo de identificar todas as fontes de erros que podem existir em um método analítico e de determinar como corrigi-los.



Controle de qualidade

Preparo e uso de gráficos de controle

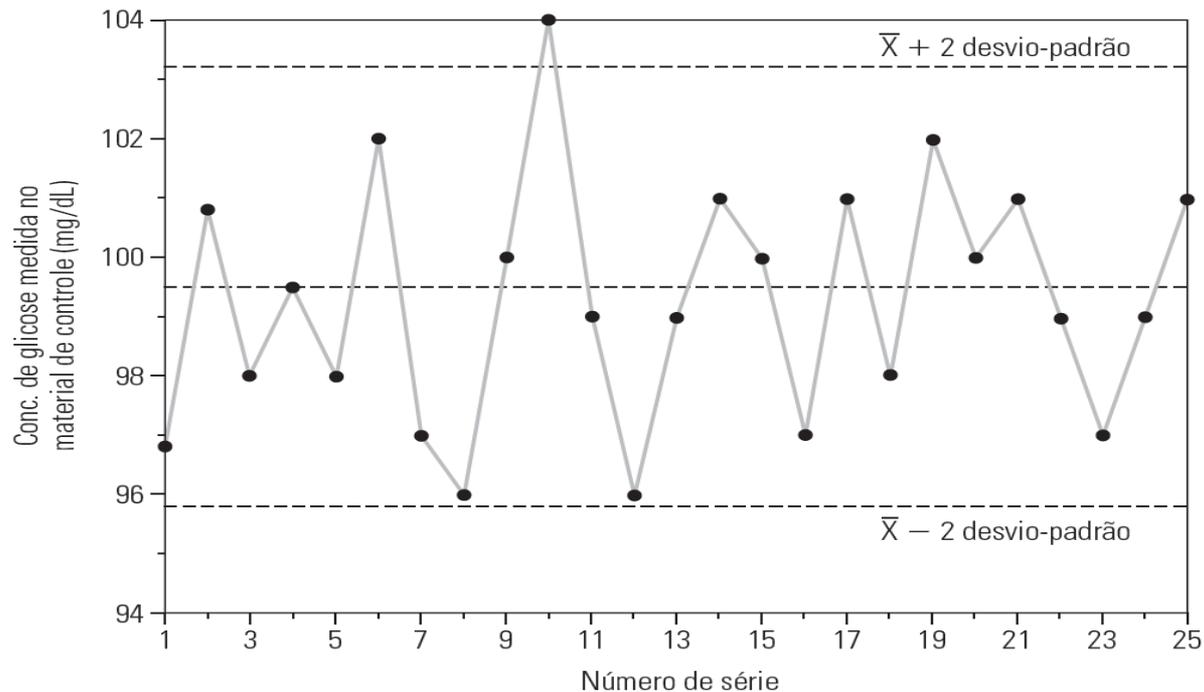
- O primeiro passo para elaborar um gráfico de controle é obter um material de controle com o analito na matriz apropriada e nas concentrações adequadas.
- Em seguida, ele é analisado várias vezes por meio do método a ser avaliado.
- Então, calculam-se a média e o desvio-padrão dos resultados para esse material de controle, que serão aplicados na montagem de um gráfico de controle para a técnica analítica.



Controle de qualidade

Preparo e uso de gráficos de controle

- A figura abaixo mostra o gráfico conhecido como *Levey-Jennings* ou gráfico individual.



Coleta e preparo de amostra

Coleta de amostra

- A abordagem específica usada na obtenção de uma amostra é conhecida como *plano de amostragem*.
- Um plano de amostragem deve incluir todas as etapas envolvidas na seleção, na extração, na conservação, no transporte e na preparação dos materiais a serem estudados em um laboratório.
- A falha na obtenção de uma amostra verdadeiramente representativa levará a um **erro de amostragem**.



Coleta e preparo de amostra

Coleta de amostra

- Trata-se de um erro criado quando se usa apenas uma parte de uma substância não uniforme para análise.
- O tamanho do erro de amostragem vai depender do número de 'partículas' em sua amostra coletada e da fração do material total que é analisado.
- A tabela a seguir lista várias abordagens que podem ser utilizadas para se obter uma amostra de um material.



Coleta e preparo de amostra

Tipo de amostra	Definição
Amostra aleatória	Uma amostra selecionada de modo que qualquer porção do material tenha a mesma chance de ser escolhida.
Amostra representativa	Amostra escolhida para representar as propriedades de todo o material a ser estudado.
Amostra seletiva	Amostra selecionada para ter certas características.
Amostra sequencial	Amostras obtidas uma após a outra para monitorar as mudanças em um material ao longo do tempo.
Amostra estratificada	Uma amostra extraída de uma parte específica de um material.
Amostra arbitrada	Amostra coletada e tratada de forma previamente combinada com o propósito de resolver um litígio.



Coleta e preparo de amostra

Preparo da amostra

- **Objetivos do preparo da amostra.** Uma razão habitual é que os analitos não estão presentes em uma matriz apropriada para o método escolhido.
- Uma segunda razão para o pré-tratamento é que se deve lidar com substâncias presentes na amostra que interfiram na medição do analito.
- Uma terceira razão para o pré-tratamento da amostra é a colocação do analito em uma forma química que possa ser estudada por seu método.



Coleta e preparo de amostra

Preparo da amostra

- A quarta razão para o pré-tratamento da amostra é colocar a substância em um nível que seja adequado à detecção.
- **Métodos de preparação.** Nos gráficos a seguir são apresentados diferentes métodos de preparação de amostras, bem como suas frequências de utilização.
- Muitas vezes, o preparo de amostras requer mais de uma etapa, como pesagem, dissolução e filtragem para preparar amostras líquidas a partir de sólidos.



Literatura

Fonte dos Slides:

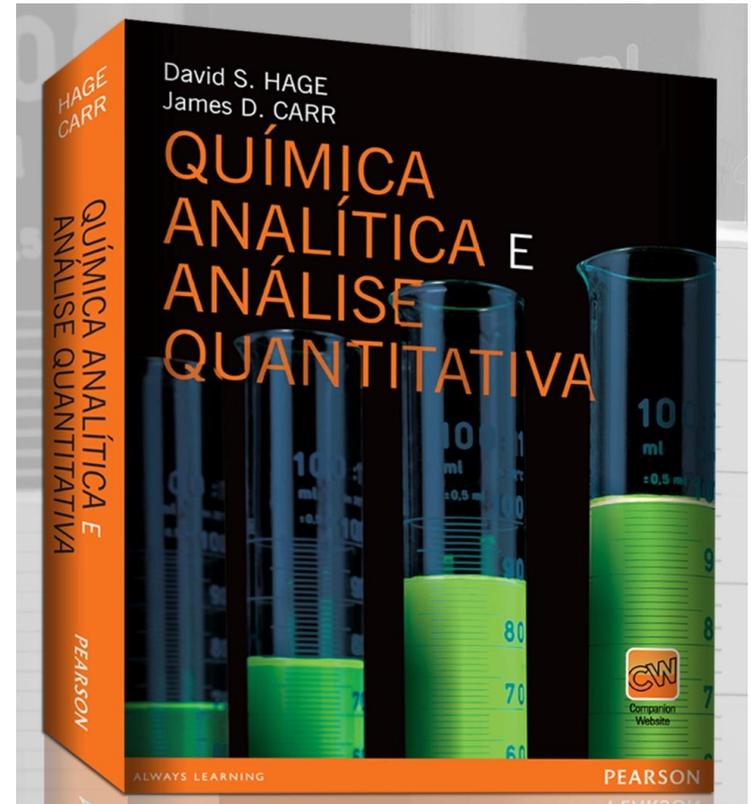
Química Analítica e Análise Quantitativa
Hage/Carr - Pearson/Prentice Hall

Outra literatura:

Análise Química Quantitativa Vogel -
Jeffery/Bassett/Mendham/Denney
LTC Editora

Química - A Ciência Central, 9ª Edição - Pearson/Prentice Hall

Química Geral - Vol. 1 - Brady/Humiston – 2ª Edição – LTC Editora



Prova

Fazer em casa. Escrever a mão e enviar fotografia da prova antes da próxima aula. Indicar como os cálculos são feitos (algarismos significativos / incerteza absoluta).

Considere o conjunto de valores das seguintes pesagens:

A	B	C	D	E
16,40	0,888	35,64	0,1006	0,0765
16,36	0,889	35,80	0,0991	0,0761
16,26	0,904	35,59	0,1010	0,0747
16,34		35,57	0,0997	0,0745
			0,0999	

- Calcule a média e desvio padrão para as amostras A, B e C da tabela acima.
- Comente qual das amostras mostrou o resultado mais preciso e por que?
- Se o peso esperado para a amostra C é 38,50, o que podemos dizer dos resultados obtidos? Explique.
- Considere que as amostras D e E são pesagens feitas de uma mesma amostra, mas por laboratórios diferentes. O resultado esperado era 70 mg. Diga qual o laboratório mais exato e quais erros sistemáticos podem ter sido cometidos no caso do laboratório inexato.



Videos desta aula:

O que são Testes de Hipótese? - Bioestatística #9

<https://www.youtube.com/watch?v=FZHqrVyc104>

What is a t-test?

<https://www.youtube.com/watch?v=N2dYGnZ70X0>

#08 - Distribuição t-Student - Conceitos e Tabela

https://www.youtube.com/watch?v=y_UOcQMpms

Regressão Linear simples e descomplicada!!!

<https://www.youtube.com/watch?v=fgNGtzJvSdl>

