

controle_qualidade_aps1

June 25, 2018

```
In [ ]: Pkg.add("DataFrames");  
        using DataFrames;  
        Pkg.add("Gadfly");  
        using Gadfly;
```

```
In [ ]: ### Fundamentos de Controle de Qualidade
```

Considere o aspecto de absorção molecular na região do UV-Vis da figura abaixo:
Para construção da curva analítica de calibração, a absorbância de 7 amostras padrão foi medida em 465nm.

Considere $\delta x = 0,056$.

(a) Construa a tabela de dados.

```
In [94]: table = DataFrame(Concentração = Float32[], Área = Float16[]);  
        # 2.2 cm = 1 absorbância  
        push!(table, [0.1 0.0]);  
        push!(table, [0.5, (0.5/2.2)]);  
        push!(table, [1, (1.3/2.2)]);  
        push!(table, [2, (2.5/2.2)]);  
        push!(table, [3, (3.65/2.2)]);  
        push!(table, [4, (4.25/2.2)]);  
        push!(table, [5, (5.4/2.2)]);  
        table
```

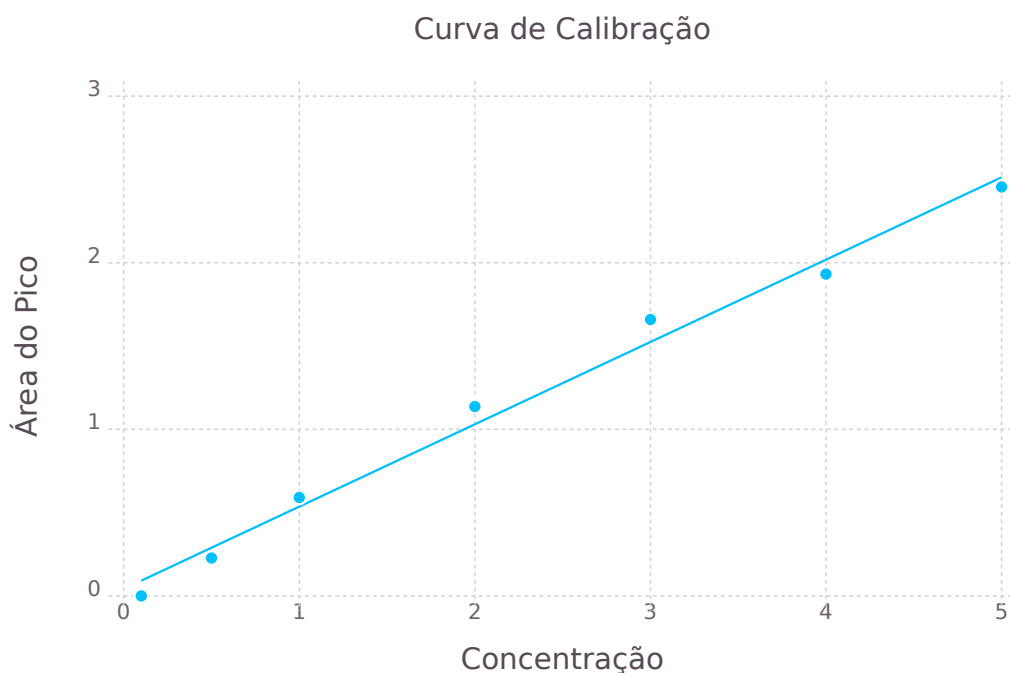
```
Out[94]: 7E2 DataFrames.DataFrame  
        Row  Concentração  Área  
  
        1    0.1           0.0  
        2    0.5           0.22729  
        3    1.0           0.59082  
        4    2.0           1.1367  
        5    3.0           1.6592  
        6    4.0           1.9316  
        7    5.0           2.4551
```

(b) Construa a curva analítica no excel.

```
In [26]: a, b = linreg(convert(Array,table[:,1]), convert(Array,table[:,2]));
         equacao_reta = b*(table[:,1]) + a;
```

```
In [96]: plot_object = plot(
         layer(table, x=:Concentração, y=:Área, Geom.point),
         layer(x=table[:,1], y=equacao_reta, Geom.line),
         Guide.xlabel("Concentração"),
         Guide.ylabel("Área do Pico"),
         Guide.title("Curva de Calibração")
       )
```

Out[96]:



(c) Determine os parâmetros de linearidade – a, b, R². Seja a mediana $\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i$, o vetor resíduos $e_i = y_i - f_i$, a soma dos quadrados $SS_{tot} = \sum_i (y_i - \bar{y})^2$, a soma dos quadrados de regressão $SS_{reg} = \sum_i (f_i - \bar{y})^2$, e a soma dos quadrados residuais $SS_{res} = \sum_i e_i^2$, podemos encontrar o coeficiente de correlação R^2 através de $R^2 = 1 - \frac{SS_{res}}{SS_{tot}}$.

```
In [88]: mediana = sum(table[:,2])/length(table[:,2]);
         vetor_residuos = map(-, table[:,2], equacao_reta);
```

```

yi_y = table[:,2] - mediana;
SS_tot = sum(abs2, yi_y);
SS_res = sum(abs2, vetor_residuos);
Rš = 1 - (SS_res/SS_tot);

```

```

In [97]: println("Respostas (b)");
println("a: $a");
println("b: $b");
println("Rš: $Rš");

```

```

Respostas (b)
a: 0.041719437
b: 0.49414718
Rš: 0.989026

```

(d) Escreva a equação da reta.

```

In [89]: println("y = $b", "x + $a");

y = 0.49414718x + 0.041719437

```

(e) Calcule a sensibilidade.

```

In [73]: println("A sensibilidade é o próprio coeficiente angular b = $b");

A sensibilidade é o próprio coeficiente angular b = 0.49414718

```

(f) Calcule a sensibilidade analítica. Seja a sensibilidade analítica $\gamma = \frac{b}{||\delta x||}$

```

In [78]: x = 0.056;
         = b/x;
         println("A sensibilidade analítica é = $");

A sensibilidade analítica é = 8.824056812695094

```

(g) Calcule os limites de detecção e quantificação. Seja o limite de detecção $LD = 3,3\frac{s}{S}$ onde $s = \delta x$ e $S = b$.

```

In [82]: limite_deteccao = (3.3)(x/b);
         println("O limite de detecção é: $limite_deteccao");

O limite de detecção é: 0.3739776465686756

```

Seja o limite de quantificação $LQ = 10\frac{s}{S}$ onde $s = \delta x$ e $S = b$

```
In [90]: limite_quantificacao = (10)(x/b);
        println("O limite de quantificação é: $limite_quantificacao");
```

O limite de quantificação é: 1.1332655956626534

(h) Qual o valor da concentração para a amostra que apresenta valores de absorbância em 450 nm igual a 0,64 e 2,3. Aqui basta utilizar a equação da reta encontrada de forma que $y = bx + a$ então $x = \frac{y-a}{b}$.

```
In [93]: concentracao(c) = (c - a)/b;
        println("O valor da concentração para a amostra de absorbância 0,64 é igual a ", concentracao(0.64));
        println("O valor da concentração para a amostra de absorbância 2,3 é igual a ", concentracao(2.3));
```

O valor da concentração para a amostra de absorbância 0,64 é igual a 1.2107335339344936

O valor da concentração para a amostra de absorbância 2,3 é igual a 4.570056549648787