

Estadística: Rol en el desarrollo y validación del método analítico.



¿Quién es AMAS INNOVATIONS?



- **Eficiencia:** Rapidez y sostenibilidad
- **Cumplimiento:** Observación de la normativa
- **Vanguardia:** Investigación constante
- **Integración:** Experiencia técnica y científica
- **Foco en la personas:** Capacitaciones y Mentoring

Es una empresa con un concepto innovador que provee soluciones a la industria química y farmacéutica, conformada por un equipo multidisciplinario unidos por el compromiso profesional de dar respuestas rápidas y eficientes a nuestros socios comerciales.

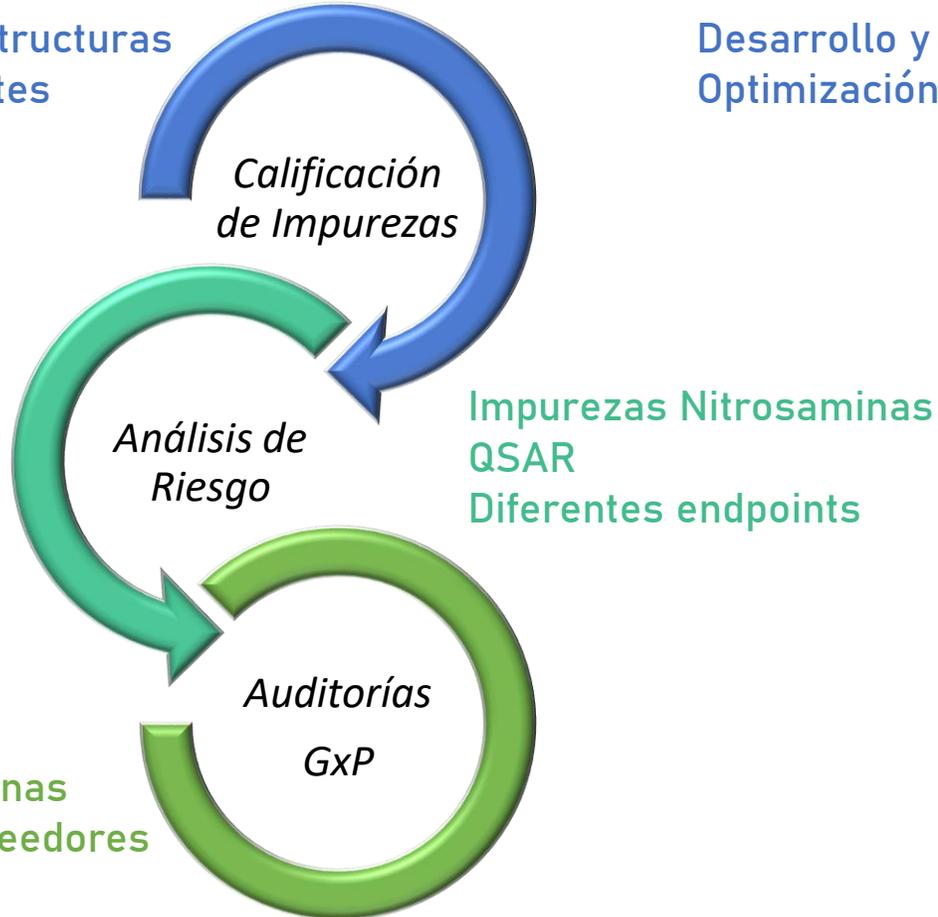




AMAS INNOVATIONS

CONSULTANCY & COACHING

Elucidación de estructuras
Definición de límites



Desarrollo y validación de MA
Optimización de MA



Bienvenidos

Conversatorio

*Estadística: Rol en el desarrollo y validación
del método analítico*



**Conversemos sobre
Estadística y su
aplicación en
Química Analítica**



{a}

MSc. Carlos Gómez

Nuestro Invitado

Profesional con más de 20 años de experiencia en métodos estadísticos aplicados en Química. Es Bioquímico y Químico de la Universidad de Chile y Magíster en Estadística de la Pontificia Universidad Católica de Chile.

Profesor de Postítulo de la Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas de la Universidad de Chile. Ha sido representante del Sistema Interamericano de Metrología en el Key Comparison Working Group del CCQM.

Ha sido relator en temas de metrología química y dictado cursos de estadística aplicada en validación de métodos analíticos y procesos farmacéuticos.

Actualmente se desempeña como Gestor de Calidad de Billetes & Monedas en el Banco Central de Chile.

Dirige [Analytical](#), consultora especializada en la aplicación de métodos Estadísticos modernos en Química.



Programa

En vivo - 11 FEB 2025

Bienvenida e introducción

Respuestas a las preguntas recibidas durante el proceso de registro

Sesión de preguntas y respuestas en vivo

Resumen



Información de interés

- *Por favor utilice el botón de PyR para enviar sus preguntas durante el desarrollo de la actividad*
- *Posterior a la actividad, se compartirá vía email:*
 - *Link de acceso al video del conversatorio*
 - *Diapositivas*

¿Cuáles son las pruebas estadísticas más recomendadas para cada uno de los parámetros de validación de un método de ensayo?

No existe una prueba estadística “perfecta” aplicable a todas las situaciones y conjunto de datos

Siempre de debe verificar las suposiciones de los test:

- Normalidad
- Homocedasticidad
- Independencia
- Etc.

¿Cómo aplicar pruebas ANOVA para los test de reproducibilidad y repetibilidad?

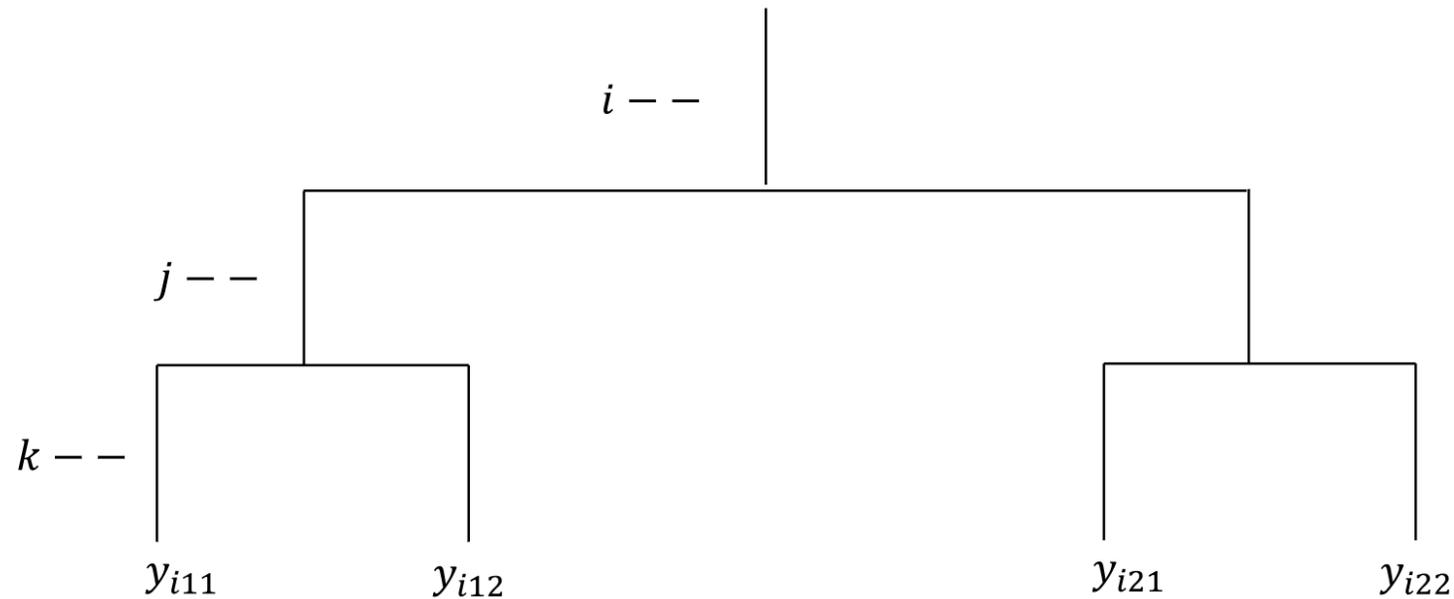
Factor

0 (Laboratorio)

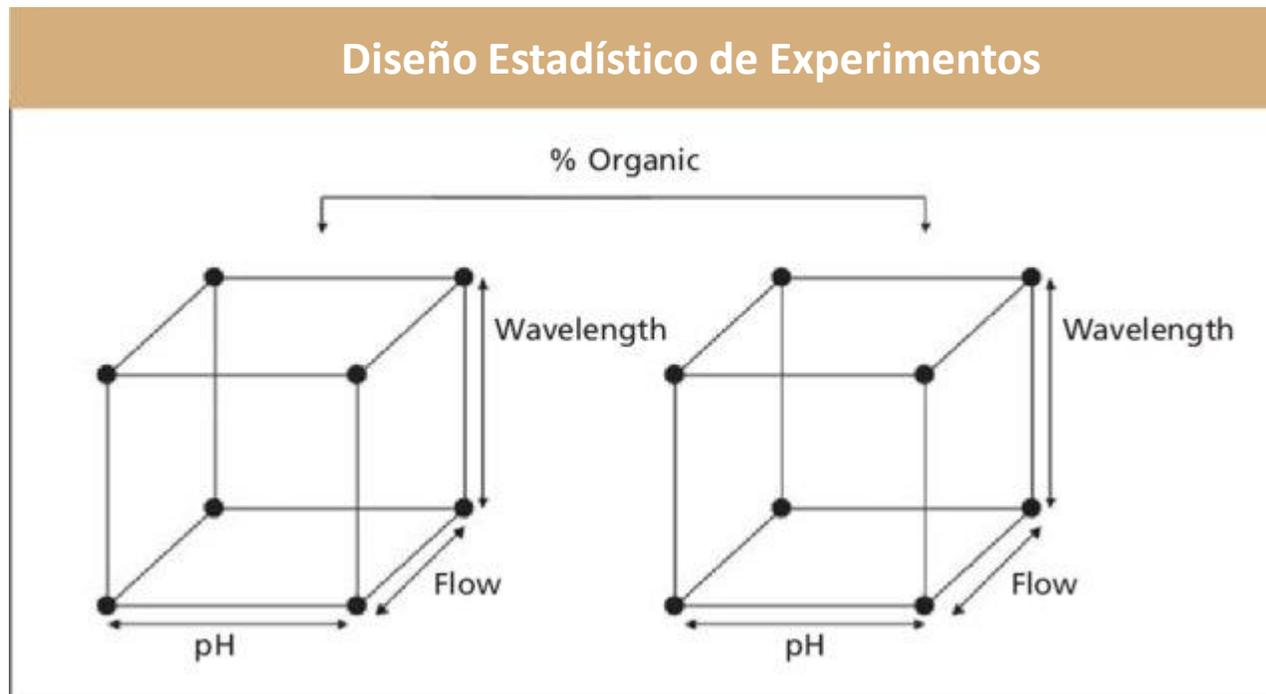
1 (Replicado)

2 (Residual)

y_{ijk}



¿Cuál es la metodología recomendable para evaluar la robustez de un método analítico?



¿Por qué usar R para el tratamiento de datos analíticos?

analytical {

Me encanta Excel y Minitab
¿Qué me estoy perdiendo?



Minitab 



Carlos Gómez

Metrólogo Químico

Lenguajes de programación: R, Python, Stata, SAS, etc.

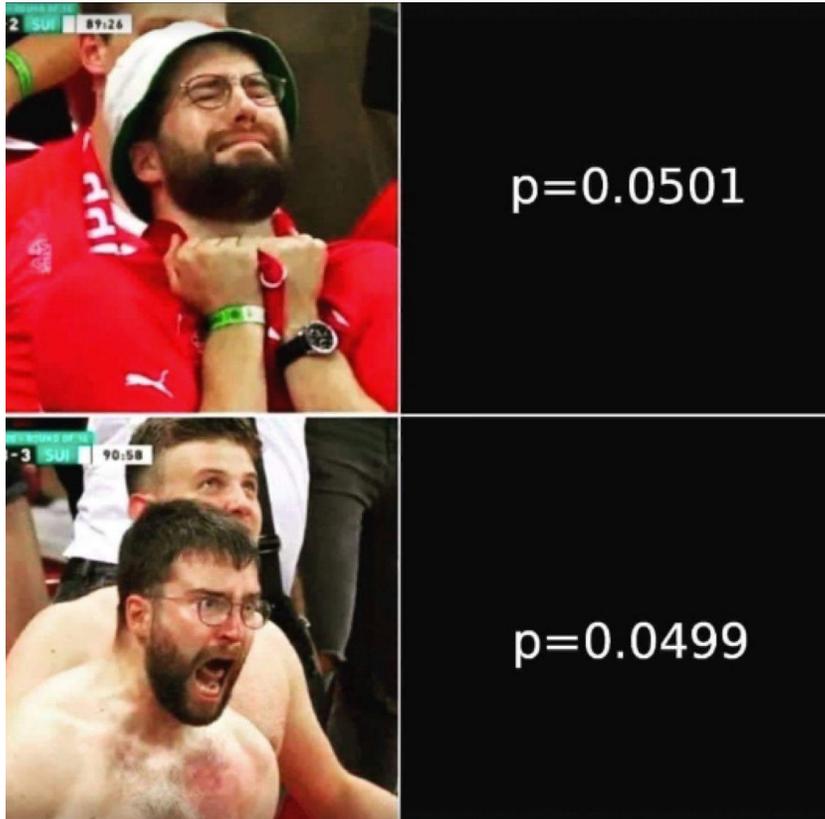
Podríamos usar cualquiera de ellos para evaluar datos analítico, pero... ¿por qué reinventar la rueda?

R posee muchas librerías especializadas en Química Analítica:

- Cálculo de incertidumbre
- Quimiometría/Chemometrics
- Calibración lineal y no lineal
- Espectroscopía
- Etc.

[Link al post](#)

¿Cómo puedo probar realmente si hay una significancia de una variable si el t de Student es mayor al T de tablas?



The American Statistician

ISSN: 0003-1305 (Print) 1537-2731 (Online) Journal homepage: <https://www.tandfonline.com/loi/utas20>

The ASA Statement on p -Values: Context, Process, and Purpose

Ronald L. Wasserstein & Nicole A. Lazar

¿Cómo puedo probar realmente si hay una significancia de una variable si el t de Student es mayor al T de tablas?

nature

[Explore content](#) ▾ [Journal information](#) ▾ [Publish with us](#) ▾ [Subscribe](#)

[nature](#) > [editorials](#) > [article](#)

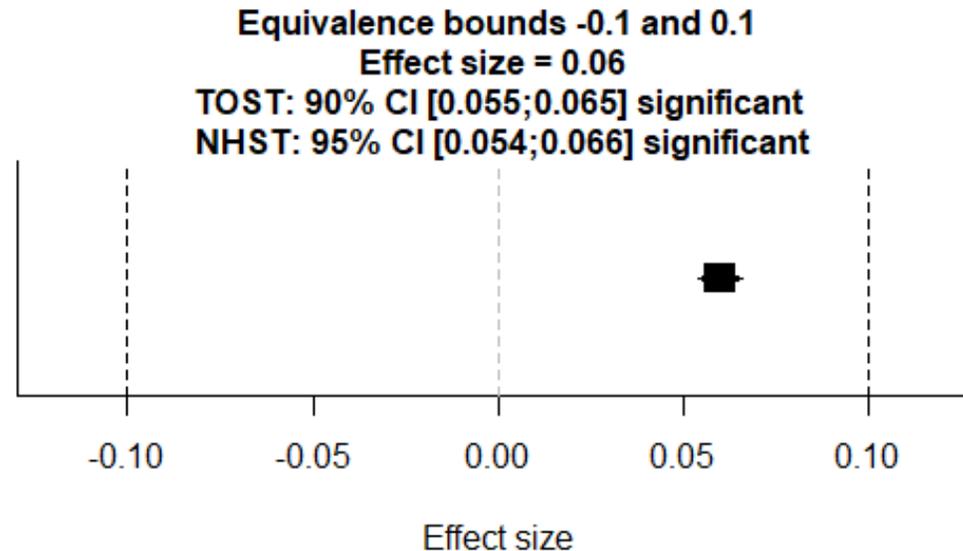
EDITORIAL | 20 March 2019

It's time to talk about ditching statistical significance

Looking beyond a much used and abused measure would make science harder, but better.

¿Cómo puedo probar realmente si hay una significancia de una variable si el t de Student es mayor al T de tablas?

Significancia estadística no implica, necesariamente,
Significancia práctica



¿Cuántos experimentos independientes se deben de ejecutar para confirmar las condiciones óptimas del método?

¿Cuántas muestras debe analizar?

*Tal como está planteada,
esta pregunta no tiene respuesta*



Se necesita, en primer lugar, establecer un criterio u objetivo:

- ¿cuál es la desviación que estás dispuesto(a) a aceptar en la estimación?
- ¿Cuál es la repetibilidad del método?
- Etc.

[Link al post](#)

¿Cuáles son las pruebas estadísticas más recomendadas para cada uno de los parámetros de validación de un método de ensayo?

Por ejemplo, test de sesgo utilizando un material de referencia certificado ¿Qué le falta a este test?

$$\begin{array}{l} \sim t \text{ de Student} \leftarrow \\ \begin{array}{l} \frac{\bar{X} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} \sim \text{Normal}(0, 1) \\ t = \frac{\bar{X} - \mu}{\sqrt{S^2/n}} \sim t_{n-1}, \\ \rightarrow (n-1) \frac{S^2}{\sigma^2} \sim \chi_{n-1}^2 \end{array} \end{array}$$



¿Es necesario realizar un estudio previo de homogeneidad y/o estabilidad de la muestra natural que será utilizada durante la validación de método?

Respuesta corta: Sí.

Respuesta muy larga: depende

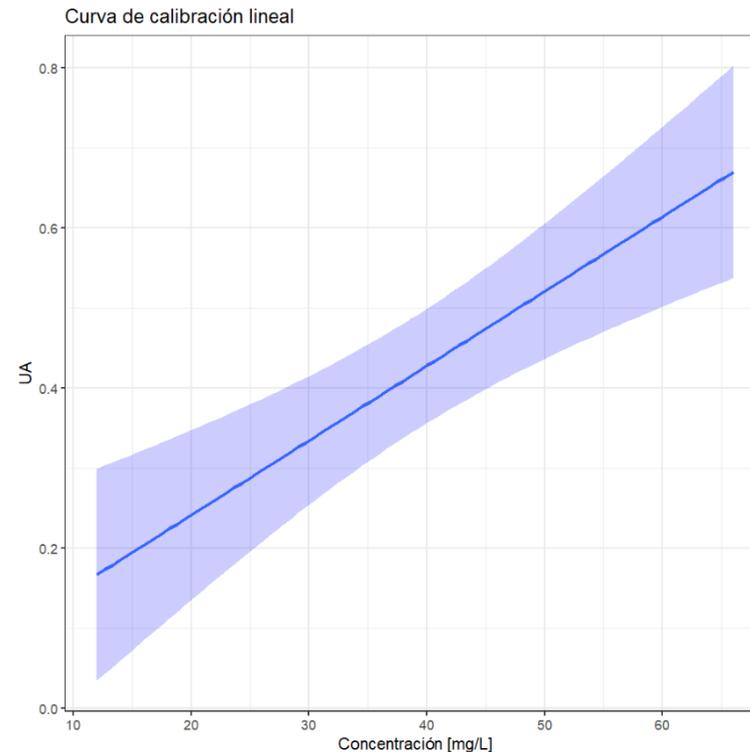
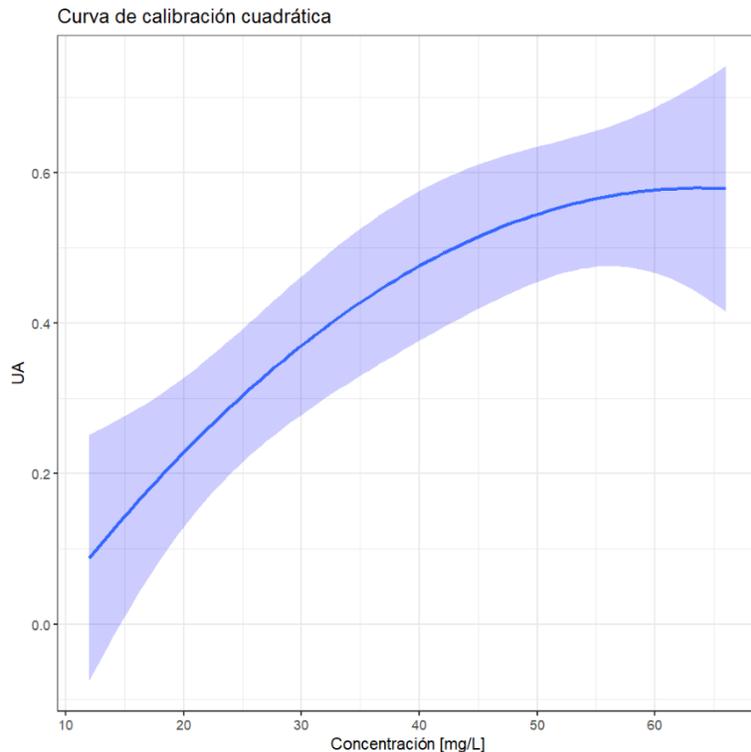
Problema: ¿cómo separar la variabilidad analítica de la heterogeneidad de la porción de muestra?

¿Si el T student me dice que un dato o varios datos no son confiables, pero otro test estadístico por ejemplo Test de Grubbs me dice que los datos si son válidos, lo puedo defender en una auditoría?

Test T evalúa diferencias “estadísticamente significativas”

El test de Grubbs evalúa la presencia de datos anómalos

¿Cómo se puede aplicar software estadístico para evaluar curvas de calibración?

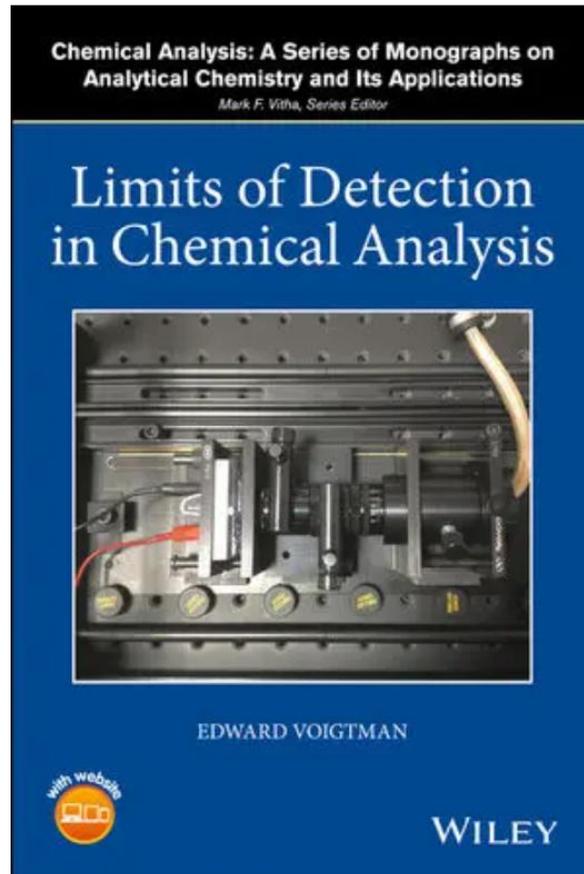


En R existen packages que permiten hacer el análisis completo de la calibración:

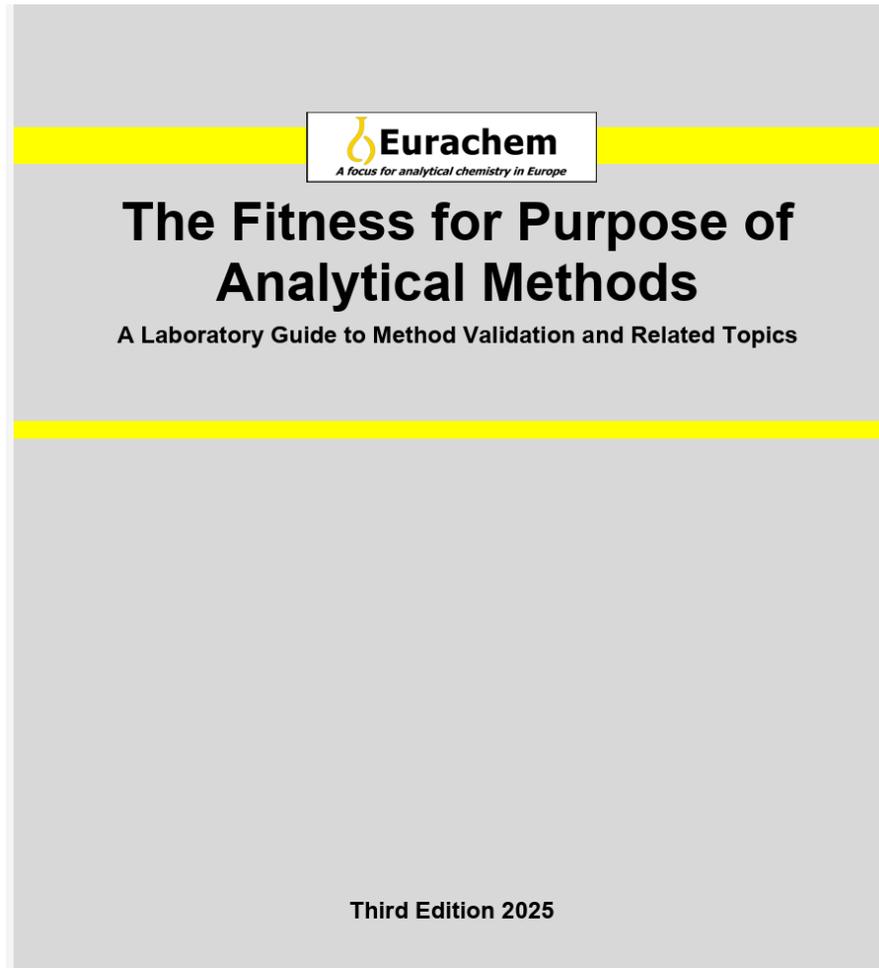
- chemCal
- olsrr
- Car
- Etc.

- ¿y qué pasa con Excel? ¿Minitab? ¿Stata?

¿Cómo debe calcularse de forma más confiable el límite de detección y cuantificación de un método analítico?



¿Cómo validar un método analítico?



El objetivo más importante durante una validación:

“Fitness for purpose”

<https://www.eurachem.org/index.php/publications/guides/mv>

En una precisión intermedia (PI) donde no se especifica la prueba estadística en la normativa (ej. resolución exenta 201 del ISP) ¿Cómo se llega a definir? ¿Conviene t-student en una PI de un test de disolución?

Respuesta corta: utilizar el test de Chi-cuadrado para evaluar la precisión experimental versus una precisión especificada

Respuesta larga: depende

Cómo determinar la incertidumbre de una serie de datos



<https://eurachem.org/index.php/publications/guides/quam#translations>

¿Es necesario ser especialista en diseño de experimentos para aplicar el AQbD?



¿Qué ventajas tiene el desarrollo de métodos por AQbD frente al modo de trabajo convencional?



Preguntas y respuestas en vivo...



MSc. Carlos Gómez



Año 2025

ICH

Q14/Q2(R2)



iNuevo Curso!



Amas Innovations SpA



Suscríbete

Analytical



www.amasinnovations.com



www.analytical.cl

¡Estamos comprometidos con tu éxito!
LA ACCIÓN ES EL PRIMER PASO



www.amasinnovations.com



contacto@amasinnovations.com



Amas Innovations SpA



+56 9 6299 4533