



Memòria justificativa de recerca de les convocatòries ACOM, AMIC, AREM, ARAFI, ARAI, ARIE, CTP-ITT, CTP-XI, EXCAVA, MQD, PBR, RDG i XIRE

La memòria justificativa consta de les dues parts que venen a continuació:

- 1.- Dades bàsiques i resums
- 2.- Memòria del treball (informe científic)

Tots els camps són obligatoris

1.- Dades bàsiques i resums

Nom de la convocatòria

MQD

Llegenda per a les convocatòries:

| | |
|---------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| ACOM | Ajuts a projectes de recerca d'abast local i comarcal |
| AMIC | Ajuts per a projectes de recerca en matèria d'immigració internacional a Catalunya |
| AREM | Ajuts per a projectes adreçats a la recuperació de la memòria històrica |
| ARAFI | Ajuts per incentivar la recerca aplicada i la formació universitària en matèria d'immigració a Catalunya |
| ARAI | Ajuts per a incentivar la recerca aplicada en matèria d'immigració a Catalunya |
| ARIE | Ajuts per a donar suport al desenvolupament de projectes de recerca i innovació en matèria educativa i d'ensenyament formal i no formal |
| CTP-ITT | Ajuts per accions de cooperació en el marc de la comunitat de treball dels Pirineus Ajuts per a projectes d'investigació i desenvolupament tecnològic. |
| CTP-XI | Ajuts per accions de cooperació en el marc de la comunitat de treball dels Pirineus Ajuts per al desenvolupament i la consolidació de xarxes temàtiques de recerca. |
| EXCAVA | Ajuts per al desenvolupament de treballs de camp de prospecció i/o excavació arqueològica o paleontològica de rellevància científica i d'impacte internacional |
| MQD | Ajuts per al finançament de projectes per a la millora de la qualitat docent a les universitats de Catalunya |
| PBR | PBR Projectes Batista i Roca. Ajuts per al finançament de projectes de recerca en l'àmbit de les Ciències Socials i les Humanitats |
| RDG | Ajuts per al finançament de projectes de recerca que tinguin per finalitat l'estudi de les desigualtats i violències originades per motius de gènere |
| XIRE | Ajuts per a donar suport a l'establiment de xarxes incentivadores de la recerca educativa |

Títol del projecte ha de sintetitzar la temàtica científica del vostre document.

CREACIÓ D'UN PROGRAMARI PER A L'AVALUACIÓ DE LA QUALITAT DELS RESULTATS ANALÍTICS GENERATS AL LABORATORI

Dades de l'investigador responsable

Nom: RICARD
Cognoms: BOQUÉ MARTÍ

Correu electrònic:
ricard.boque@urv.cat





Dades de la universitat / centre al que s'està vinculat
UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI / FACULTAT DE QUÍMICA

Número d'expedient
2006MQD00019

Paraules clau: cal que esmenteu cinc conceptes que defineixin el contingut de la vostra memòria.
Programari, qualitat, resultats analítics, validació, exactitud

Data de presentació de la justificació
14/12/2007

Nom i cognoms i signatura
del/de la investigador/a

RICARD BOQUÉ MARTÍ

JOAN IGUAL RIPOLLÉS

Vistiplau del/de la beneficiari/ària





Resum del projecte: cal adjuntar dos resums del document, l'un en anglès i l'altre en la llengua del document, on a més s'esmenti les dades següents: les dades del lloc on s'ha fet l'estada i la durada del projecte.

Resum en la llengua del projecte (màxim 300 paraules)

La validació de mètodes és un dels pilars fonamentals de l'assegurament de la qualitat en els laboratoris d'anàlisi, tal i com queda reflectit en la norma ISO/IEC 17025. És, per tant, un aspecte que cal abordar en els plans d'estudis dels presents i dels futurs graus en Química. Existeix molta bibliografia relativa a la validació de mètodes, però molt sovint aquesta s'utilitza poc, degut a la dificultat manifesta de processar tota la informació disponible i aplicar-la al laboratori i als problemes concrets.

Una altra de les limitacions en aquest camp és la manca de programaris adaptats a les necessitats del laboratori. Moltes de les rutines estadístiques que es fan servir en validació de mètodes són adaptacions fetes amb Microsoft Excel o venen incorporades en paquets estadístics gegants, amb un alt grau e complexitat.

És per aquest motiu que l'objectiu del projecte ha estat generar un programari per la validació de mètodes i l'assegurament de la qualitat dels resultats analítics, que incorporés únicament les rutines necessàries. Específicament, el programari incorpora les funcions estadístiques necessàries per a verificar l'exactitud i avaluar la precisió d'un mètode analític.

El llenguatge de programació triat ha estat el Java en la seva versió 6. La part de creació del programari ha constatat de les següents etapes: recollida de requisits, anàlisi dels requisits, disseny del programari en mòduls, programació de les funcions del programa i de la interfície gràfica, creació de tests d'integració i prova amb usuaris reals, i, finalment, la posada en funcionament del programari (creació de l'instal·lador i distribució del programari).

Resum en anglès (màxim 300 paraules)

Method validation is one of main pillars in laboratory quality assurance, as the international ISO/IEC 17025 norm states. It is then an important aspect that has to be tackled in the curricula of the current and future degrees of Chemistry. There is an abundant literature on method validation, but usually it is not much used, in part due to the difficulty in processing all the information available and in applying it to the laboratory and the specific problems.

Another limitation in this field is the lack of software that is really adapted to the laboratory needs. Many statistical routines used in method validation are just in-house adaptations done with Microsoft Excel or are incorporated in enormous statistical packages, which have a high degree of complexity.

It is for that reason that the aim of the project was to create a software for method validation and quality assurance of analytical results, which incorporated only the routines really necessary. Specifically, the software incorporates the statistical routines to assess the accuracy and evaluate the precision of an analytical method.

The programming language selected was Java, version 6. The part of software development consisted on the following steps: requirement collecting, requirement analysis, design of software in modules, programming of functions and graphical interface, creation of integration tests and testing with real users, and, finally, software startup (creation of the installer and distribution).



Resum en anglès (màxim 300 paraules) – continuació-

2.- Memòria del treball (informe científic sense limitació de paraules). Pot incloure altres fitxers de qualsevol mena, no més grans de 10 MB cadascun d'ells.

Introducció

S'han desenvolupat les rutines i les proves estadístiques per a verificar l'exactitud i avaluar la precisió d'un mètode analític. En concret:

- 1) EXACTITUD
 - a. Front material de referència
 - b. Front mètode de referència
 - c. Front mostres addicionades
- 2) PRECISIÓ
 - a. Repetibilitat:
 - b. Precisió intermèdia (o reproductibilitat dintre del laboratori):

L'usuari pot introduir les dades manualment o recuperar-les des d'un arxiu ja creat. Les dades poden crear-se a partir d'un disseny experimental, que en el nostre cas és un disseny niuat de 2 factors.

Metodologia

La part de creació del programari s'ha realitzat sota una metodologia de desenvolupament basada en una versió reduïda del mètode de desenvolupament RUP¹ (Rational Unified Process), i consta de les següents etapes:

- **Recollida de requisits:** esbrinar amb precisió les funcionalitats que el client necessita en el programari creat.
- **Anàlisi:** anàlisi dels requisits per determinar la viabilitat de cadascun d'ells, i formalitzar els requisits recollits.

¹ http://en.wikipedia.org/wiki/Rational_Unified_Process



- **Disseny:** Creació d'un disseny arquitectònic del programari que el divideixi en mòduls i permeti organitzar la implementació.
- **Implementació:** Programació de les funcions del programa (requisits de procés) i de la interfície gràfica que permet accedir a aquestes funcions (requisits d'interfície d'usuari), així com la prova amb tests interns de tota la funcionalitat.
- **Prova:** Creació de tests d'integració per comprovar la cohesió de les funcionalitats del programari i prova amb usuaris reals.
- **Enggada:** Posada en funcionament del programari (creació de l'instal·lador i distribució del programari).

Amb aquesta metodologia s'ha planificat el procés de creació del programari i seguint per ordre les etapes esmentades se n'ha dut a terme la seva execució.

Llenguatge de programació

En la fase de Disseny, entre altres activitats, es decideix el llenguatge de programació en el que es realitzarà el programari, un cop s'han analitzat les necessitats del client. En aquest cas es va decidir utilitzar el llenguatge de programació Java en la seva versió 6, essent aquests alguns factors que en motivaren la seva elecció:

- Sintaxi senzilla però potent.
- Àmplia varietat de llibreries incloses en el propi llenguatge (manipulació de fitxers, creació d'interfícies gràfiques, seguretat, etc.)
- Àmplia varietat de llibreries de qualitat disponibles de tercers, i amb llicències de codi lliure.
- Llenguatge i entorn d'execució multiplataforma: un únic "executable" del programa es pot utilitzar en diferents sistemes operatius (suporta sistemes Windows, Mac OS X, GNU/Linux i Solaris entre d'altres).

Programari de suport al desenvolupament

La creació de qualsevol programari requereix d'eines i aplicacions informàtiques específiques, les quals faciliten el procés de desenvolupament en les seves fases. En el present programari, s'han emprat les següents eines (categoritzades segons el seu ús en cada fase):

Recollida de requisits:

- Microsoft ® Word 2002: Edició de textos, creació de la documentació de recollida de requisits.
- JUDE Community 5.0.2: Creació de diagrames UML (Unified Modeling Language, un llenguatge gràfic per al modelat d'objectes i especificacions usat en l'enginyeria del software).

Anàlisi:

- Microsoft ® Word 2002: Edició de textos, creació de la documentació d'anàlisi.
- JUDE Community 5.0.2: Creació de diagrames UML.
- Microsoft Visio: Creació de diagrames per a la metàfora (una representació aproximada de com serà la interfície gràfica d'usuari).

Disseny:

- Microsoft ® Word 2002: Edició de textos, creació de la documentació de disseny.
- JUDE Community 5.0.2: Creació de diagrames UML.

Implementació:

- Netbeans 5.5.1: Entorn de desenvolupament (IDE, Integrated Development Environment). Utilitzat en la creació de finestres i programació de l'aplicació.
- IzPack 3.10.2: Creació de l'instal·lador del programa.
- JUnit 3: llibreria emprada en la realització dels tests unitaris.

Prova:





- Matlab 7: usat en la validació i comprovació de resultats.
- Microsoft Excel: usat en la validació i comprovació de resultats.

Llibreries

En la implementació del programari s'han utilitzat algunes llibreries de tercers. Totes les llibreries utilitzades tenen llicències de codi lliure no virals, les quals permeten una redistribució del programari conjuntament amb la llibreria en forma de programari comercial (també conegut com a privatiu) o programari de codi lliure. En particular, no hi ha cap llibreria usada que estigui sota els termes de la llicència GPL (General Public License), doncs aquesta obligaria a que el programa creat fos codi lliure i estes sota aquesta mateixa llicència. Les llibreries emprades venen llicenciades sobre alguna d'aquestes llicències no virals:

- Llicència Apache 2
- Llicència BSD
- MIT License (X License, X11 License)
- Llicència LGPL (Lesser General Public License)

Seguidament es llisten les llibreries emprades i l'ús concret que se'n fa:

- SLF4J 1.4.3 (MIT): És una façana per a diverses API's de logging (similar a la Jakarta Commons Logging o JCL).
- Logback 0.9.8 (LGPL): Llibreria de logging, successora del log4j.
- Spring Framework 2.0.6 (Apache 2): Sistema per muntar components a través de fitxers de configuració. Framework de IoC (Inversion of Control).
- Commons VFS 20070724 (Apache 2): Accés avançat a sistema de fitxers.
- SwingX 0.8.0 (LGPL): Components gràfics extra en Java (Swing).
- JGoodies Validation 2.0.0 (BSD): Validació de valors en components d'interfície gràfica.
- JGoodies Binding 2.0.1 (BSD): Sincronització de propietats d'objectes amb components de la GUI (Swing).
- Javolution 5.2.6 (BSD): Collections i utilitats de temps real.
- JScience 4.3.1 (BSD): Llibreria científica (unitats i mesures).
- XStream 1.2.2 (BSD): Persistència de dades (en XML i JSON).
- Xpp3 (BSD): requiment de la llibreria XStream.

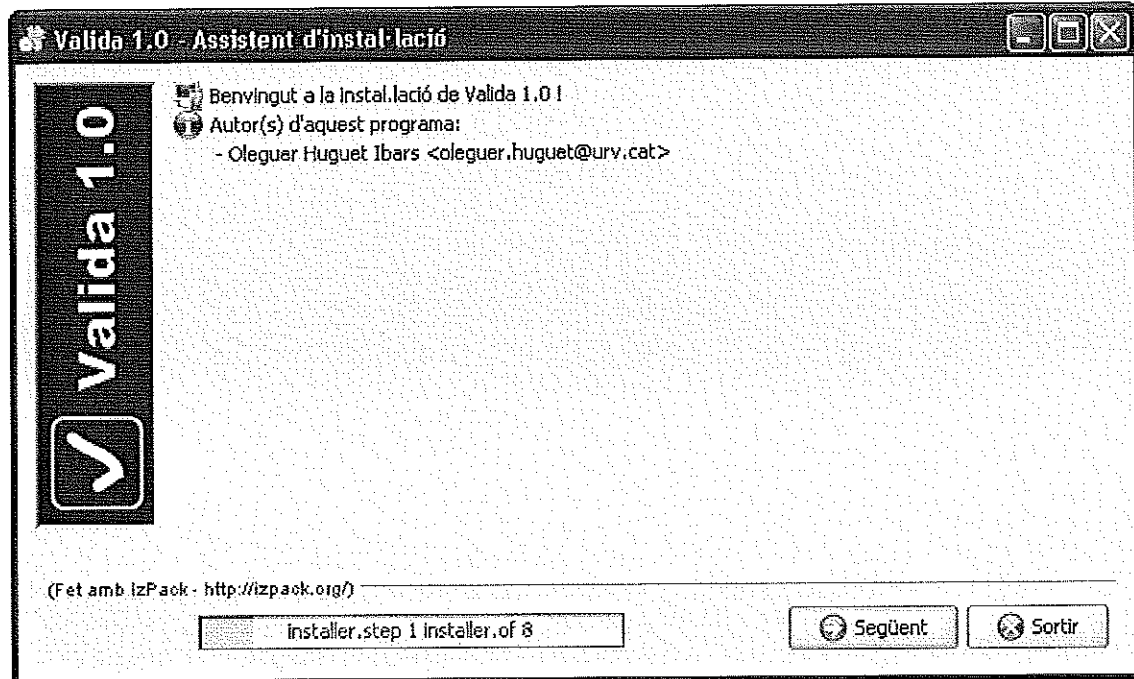
Prova

La fase de validació del programari ha anat en part lligada a la de desenvolupament, doncs a mesura que s'han implementat noves funcionalitats del programari s'ha comprovat el correcte funcionament d'aquestes a través de tests unitaris implementats amb la llibreria JUnit.

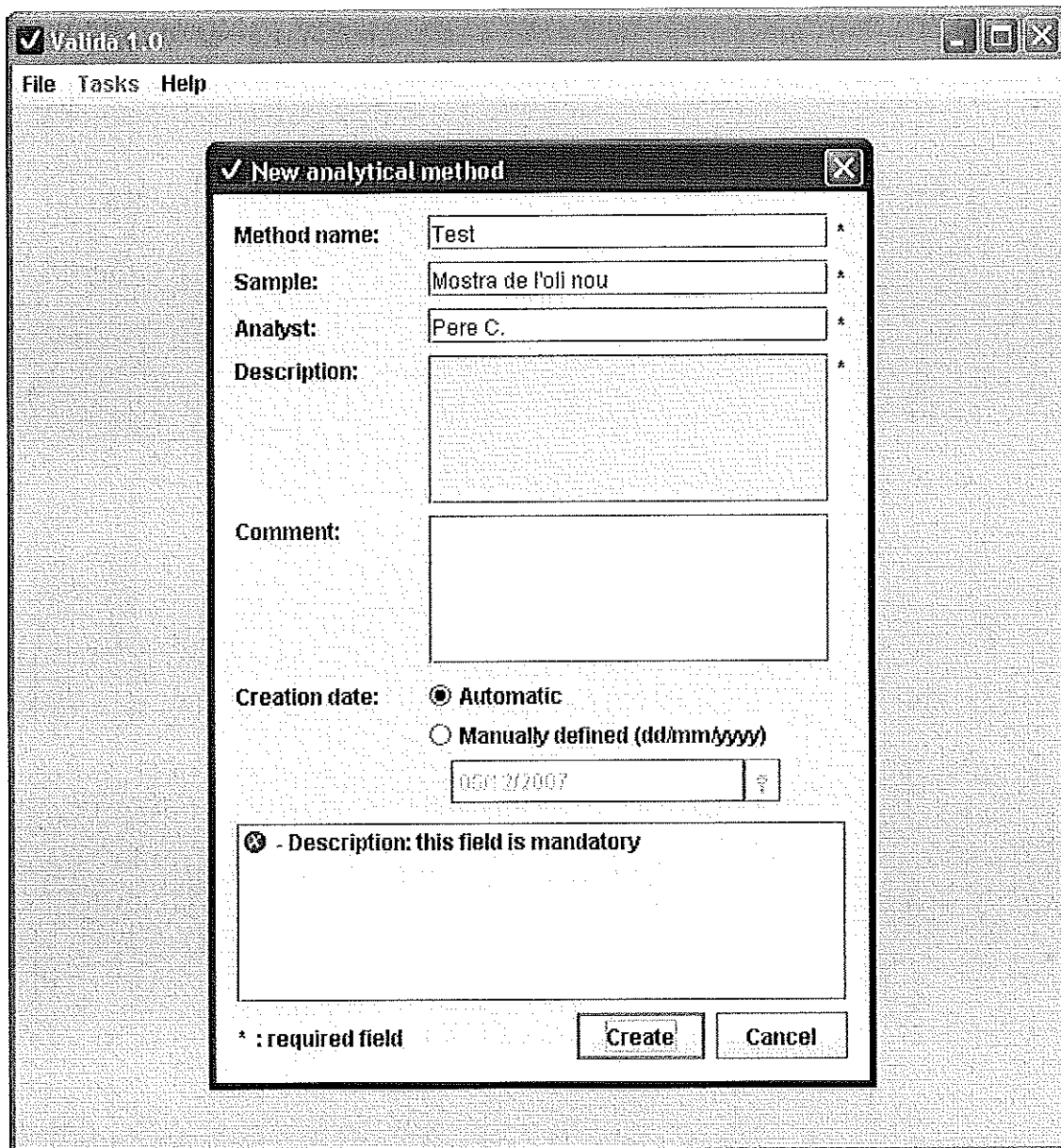
Resultats

En aquest apartat es mostren algunes captures de pantalla del programa desenvolupat (Valida 1.0).





Captura 1: Instal·lador de Valida 1.0.



Valida 1.0

File Tasks Help

✓ New analytical method

Method name: *

Sample: *

Analyst: *

Description: *

Comment:

Creation date: Automatic
 Manually defined (dd/mm/yyyy)

*** - Description: this field is mandatory**

* : required field

Create Cancel

Captura 2: Creació d'un nou mètode analític.

✓ Valida 1.0 - "a" analytical method

File Tasks Help

Trueness criteria (internal validation)

Choose a reference:

Reference material Reference method Added samples

Material analysis dataset

Dataset: Test (id 0001)

(data obtained from material analysis with the analytic method)

x_{ref} =

u_{ref} = df_{ref} =

λ = bias type =

α =

β =

Captura 3: Introducció de dades (criteri "material de referència" de la validació interna del mètode).



✓ Results viewer

| Parameter | Value | Explanation |
|-----------------------|--------|-------------------------------------------|
| sr | 1.1E-1 | Repeatability standard deviation |
| sr (%) | 1.4E0 | Relative repeatability standard deviation |
| s2r | 1.1E-2 | Repeatability variance |
| d.f. r | 3 | Degrees of freedom |
| r (95%) | 3.0E-1 | Repeatability (95%) |
| | | |
| sr _{run} | 4.4E-2 | Between-run standard deviation |
| sr _{run} (%) | 5.8E-1 | Relative between-run standard deviation |
| s2 _{run} | 1.9E-3 | Between-run variance |
| d.f. run | 0 | Degrees of freedom |
| | | |
| sl | 1.2E-1 | Intermediate standard deviation |
| sl (%) | 1.5E0 | Relative intermediate standard deviation |
| s2l | 1.3E-2 | Intermediate variance |
| d.f. l | 4 | Degrees of freedom |
| | | |
| sH | 2.7E-2 | Horwitz standard deviation |
| sH (%) | 3.6E-1 | Horwitz relative standard deviation |

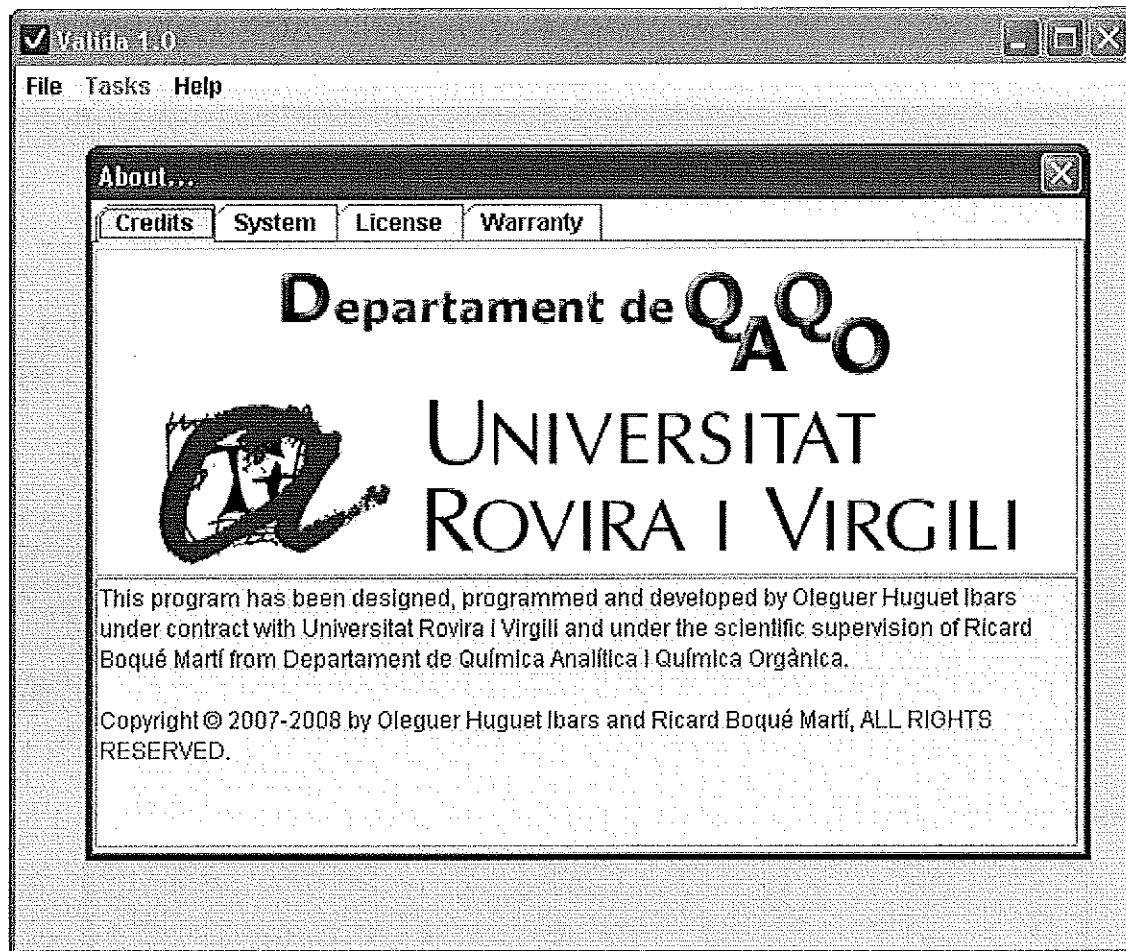
Description

Results for: Precision criteria (internal validation)

Results computed on: 05/12/2007 @ 12:22:47

Captura 4: Taula de resultats (exemple per al criteri de "precisió" de la validació interna).





Captura 5: Finestra "Sobre..."



**Agència
de Gestió d'Ajuts
Universitaris
i de Recerca**

L'AGAUR inclourà a RECERCAT la memòria justificativa en versió digital. Per aquest motiu, us demanem el vostre consentiment per introduir a RECERCAT el contingut científic de la vostra justificació de recerca. Si esteu d'acord amb aquesta proposta, cal que llegiu la licència Creative Commons i ens envieu el document que us adjuntem imprès, omplert i signat a:

Programa de documentació científica
Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca
Via Laietana, 28 2na planta
08003 Barcelona

RECERCAT

Les persones sotasignants en qualitat de beneficiàries i/o responsables de l'ajut de l'Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR), amb núm d'expedient 2006MQD00019, manifesten el seu consentiment exprés per tal que la justificació presentada en el marc de l'esmentat ajut sigui introduïda al dipòsit digital RECERCAT del Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya, d'acord amb els termes especificats a la licència Creative Commons de Reconeixement-No-Comercial-SenseObra Derivada.

Aquesta licència estableix que es permet copiar, distribuir i comunicar públicament l'obra sempre que se'n citi l'autor original i la institució que l'empara i no se'n faci cap ús amb finalitats comercials ni obra derivada. Per obra derivada s'entén aquell document que ha estat editat, traduït, combinat amb materials de tercers, canviat de format, o modificat de qualsevol altra forma.

- Sí, estic d'acord amb el text anterior.
 No, no estic d'acord.

Barcelona, 14 de desembre de 2007

Nom i cognoms i signatura
del/de la investigador/a

RICARD BOQUÉ MARTÍ

Vistiplau del/ de la beneficiari /ària

JOAN IGUAL RIPOLLÉS

Aquelles persones o institucions que ho requereixin, amb una adequada argumentació, podran sol·licitar, si escau, un retràs màxim de dos anys per introduir la memòria justificativa a Recercat.