Programa Analítico de Disciplina

QUI 314 - Otimização em Química

Departamento de Química - Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas

Catálogo: 2019

Número de créditos: 4
Carga horária semestral: 60h
Carga horária semanal teórica: 2h
Carga horária semanal prática: 2h
Semestres: I

Objetivos

- Familiarizar o aluno sobre otimização de dados químicos, variáveis de processo, de mistura e variável resposta.
- Ensinar aos estudantes como planejar experimentos de Química para que sejam coletados dados mais úteis e mais confiáveis.
- Apresentar os fundamentos dos métodos estatísticos (Planejamento Fatorial, Análise de Superfície de Resposta, Experimentos com Misturas e Otimização SIMPLEX) aos estudantes.
- Otimizar em aulas práticas, vários experimentos e metodologias de análise químicas.
- Interpretar os resultados das análises estatísticas dos dados obtidos nas aulas práticas.
- Utilizar programas computacionais para processamentos dos dados.
- Habilitar o estudantes a formular o problemas e a escolher e utilizar as ferramentas computacionais mais apropriados a cada situação.

Ementa

Introdução à otimização. Cálculo dos efeitos. Planejamento fatorial fracionário. Modelos empíricos. Planejamento experimental para misturas. Otimização simplex.

Pré e co-requisitos

QUI 310 e EST 105

Oferecimentos obrigatórios

Não definidos

Oferecimentos optativos

Curso	Grupo de optativas
Licenciatura em Química	Geral
Química - Bacharelado	Geral
Química - Licenciatura (Integral)	Geral

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://siadoc.ufv.br/validar-documento com o código: R5DY.HJKH.GG55

QUI 314 - Otimização em Química

Conteúdo					
Unidade	**T**	**P**	**ED**	**Pj**	**To**
1. **Introdução à otimização** 1. Planejamento fatorial 2n	2h	0h	0h	0h	2h
2. **Cálculo dos efeitos** 1. Interpretação dos resultados 2. Cálculo dos erros 3. Aplicação (exemplos numéricos)	5h	0h	0h	0h	5h
3. **Planejamento fatorial fracionário** 1. Como construir frações 2. Relações geradoras de fatoriais fracionários 3. Conceito de resolução 4. Triagem de variáveis 5. Aplicação (exemplos numéricos)	6h	0h	0h	0h	6h
4. **Modelos empíricos** 1. Análise de variância, intervalos de confiança 2. Significância estatística, falta de ajuste 3. Metodologia de superfícies de resposta	6h	0h	0h	0h	6h
5. **Planejamento experimental para misturas** 1. Modelos, avaliação dos modelos 2. Pseudocomponentes, falta de ajuste 3. Mistura com mais de três componentes	7h	0h	0h	0h	7h
6. **Otimização simplex** 1. Simplex básico 2. Simplex modificado supermodificado 3. Critérios de otimização	4h	0h	0h	0h	4h
7. **Otimização do método do tiocianato para determinação de Fe(III). Planejamento Fatorial completo com três fatores 23 (X1 = ácido clorídrico, X2 = persulfato de sódio e X3 = tiocianato de potássio)**	0h	4h	0h	0h	4h
8. **Otimização do método do tiocianato para determinação do Fe(III). Planejamento Fatorial Fracionário 24-1 (X1 = ácido clorídrico, X2 = persulfato de sódio, X3 = tiocianato de potássio e X4 = força iônica)**	0h	4h	0h	0h	4h
9. **Superfície de resposta com dois fatores com um ponto central. Fatores (Z1 = sulfato férrico e Z2 = sulfato de alumínio). Coprecipitação do corante Azul Benzathren**	0h	4h	0h	0h	4h
10. **Superfície de resposta. Planejamento fatorial com três fatores acrescido com um ponto central e seis pontos axiais. Fatores (Z1 = ácido clorídrico, Z2 = tiocianato de potássio e Z3 = força iônica). Otimização do método do tiocianato para determinação de Fe(III)**	0h	5h	0h	0h	5h
11. **Planejamento experimental para misturas do tipo "simplex centroid" com três componentes, X1 = água, X2 = álcool e X3 = acetona. Otimização do método do tiocianato para determinação**	0h	4h	0h	0h	4h

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://siadoc.ufv.br/validar-documento com o código: R5DY.HJKH.GG55

de Fe(III)					
12. **Planejamento experimental para misturas do tipo hexagonal nos pseudocomponentes para os componentes, X1 = água, X2 = álcool e X3 = acetona. Otimização do método do tiocianato para determinação de Fe(III)**	0h	5h	0h	0h	5h
13. **Simplex Modificado no estudo de variáveis X1 = ácido clorídrico, X2 = tiocianato de potássio para a otimização do método do tiocianato para determinação de Fe(III)**	0h	4h	0h	0h	4h
Total	**30h**	**30h**	**0h**	**0h**	**60h**

(T)Teórica; (P)Prática; (ED)Estudo Dirigido; (Pj)Projeto; Total(To)

Planejamento pedagógico	
Carga horária	**Itens**
Teórica	Apresentação de conteúdo oral e escrito com o apoio de equipamento (projetor, quadro-digital, TV, outros); Apresentação de conteúdo oral e escrito em quadro convencional; Apresentação de conteúdo pelos estudantes, mediado pelo professor; e Seminários
Prática	Prática executada por todos os estudantes e Resolução de problemas
Estudo Dirigido	Estudo dirigido e Resolução de problemas
Projeto	*Não definidos*
Recursos auxiliares	*Não definidos*

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://siadoc.ufv.br/validar-documento com o código: R5DY.HJKH.GG55

QUI 314 - Otimização em Química

Bibliografias básicas	
Descrição	**Exemplares**
BRUNS, ROY EDWARD, BARROS NETO, B.; SCARMINIO, I.S. Planejamentos e otimização de experimentos. Editora da UNICAMP, 1995.	20

Bibliografias complementares	
Descrição	**Exemplares**
HINKELMANN, K.; KEMPTHORNE, O. Design and analysis of experiments. New York: John Wiley & Sons, 2005.	3
MONTGOMERY, D.C. Design and analysis of experiments. New York, Wiley, 2005.	3
MYERS, R.H. Response Surface. New York: Wiley, 1995.	3
Periódicos:and Intelligent Laboratory Systemsof Quality Technology	0
WALTERS, F.H.; PARKER, Jr. L.R.; MORGAN, S.L.; STANLEY, N.D. Sequential Simplex Optimization CRC. Florida: Press, Inc. Florida, 1991.	1

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://siadoc.ufv.br/validar-documento com o código: R5DY.HJKH.GG55