

Programa Analítico de Disciplina

QUI 314 - Otimização em Química

Departamento de Química - Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas

Catálogo: 2020

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: 6VRP.LIU1.3RHC

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: 6VRP.LIU1.3RHC

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 em quadro convencional; Apresentação de conteúdo pelos estudantes, mediado pelo professor; Seminários; e Apresentação de conteúdo oral e escrito com o apoio de equipamento (projektor, quadro-digital, TV, outros)
Prática	Prática executada por todos os estudantes e Resolução de problemas
Estudo Dirigido	Resolução de problemas e Estudo dirigido
Projeto	<i>Não definidos</i>
Recursos auxiliares	<i>Não definidos</i>

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 Systems of 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