

## Programa Analítico de Disciplina

### QUI 314 - Planejamento e otimização de experimentos

Departamento de Química - Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas

Catálogo: 2023

Número de créditos: 4

Carga horária semestral: 60h

Carga horária semanal teórica: 4h

Carga horária semanal prática: 0h

Carga horária de extensão: 0h

Semestres: I

#### Objetivos

- Apresentar os métodos estatísticos usados nos planejamentos de experimentos.;
- Familiarizar o aluno sobre as variáveis de processo, de mistura e a variável resposta;
- Apresentar as várias possibilidades dos planejamentos de experimentos;
- Ensinar os estudantes a planejar experimentos em química para que sejam coletados dados mais úteis e mais confiáveis;
- Ensinar os diversos tipos de planejamentos usados em química tais como fatoriais completos e fracionários, análise de superfície de resposta e experimentos com misturas;
- Ensinar as estratégias para a otimização da(s) variável(eis) resposta(s) a partir dos planejamentos;
- Ensinar a usar o software Excel para planejar, realizar os cálculos algébricos, análise estatística dos resultados e a otimização;
- Apresentar estudos de caso para aplicação dos conhecimentos adquiridos;
- Interpretar os resultados dos cálculos algébricos e análises estatísticas dos resultados obtidos a partir dos estudos de caso;
- Utilizar, além do Excel, softwares comerciais para planejamento de experimentos e análises dos dados;
- Habilitar o estudante a escolher e utilizar o planejamento mais apropriado a cada situação.

#### Ementa

Erros em análise química; Erros aleatórios e distribuições de probabilidade; Tratamento e avaliação estatística dos dados; Testes estatísticos, análise de variância, regressão linear e uso do valor p; Utilização do software Excel no tratamento dos dados; Triagem de variáveis com planejamentos fatoriais completos e fracionários; Modelos empíricos em estudo de triagem; Estimativa de erro dos efeitos; Análise por meio de gráficos de probabilidade normal dos efeitos; Validação e interpretação dos efeitos, coeficientes e interação entre variáveis; Análise de variância, previsões, resíduos e validação de modelos; Utilização do software Statistica no tratamento dos dados; Metodologia de superfície de resposta e otimização de experimentos; Construção e validação de modelos empíricos; Interpretação dos resultados; Análise de planejamentos com múltiplas respostas; planejamentos de mistura.

#### Pré e correquisitos

QUI 310\* e EST 105 e MAT 137

Oferecimentos obrigatórios
<i>Não definidos</i>

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

## QUI 314 - Planejamento e otimização de experimentos

Conteúdo					
Unidade	T	P	ED	Pj	To
<p><b>1. Introdução aos planejamentos de experimentos e sua importância para os profissionais da química</b></p> <p>1. Apresentação das vantagens dos planejamentos fatoriais de dois níveis para o aumento da eficiência na obtenção dos resultados;</p> <p>2. Comparar os planejamentos univariados com os multivariados;</p> <p>3. Definir o que é otimização no contexto de modelos empíricos;</p> <p>4. Apresentar as estratégias para otimização da(s) resposta(s).</p>	4h	0h	0h	0h	4h
<p><b>2. Erros em análise química e tratamento estatístico dos dados</b></p> <p>1. Erros aleatórios e distribuição de probabilidade;</p> <p>2. Tratamento e avaliação estatística dos dados;</p> <p>3. Distribuições z, t e F, testes estatísticos, análise de variância, regressão linear e uso do valor p.</p>	4h	0h	4h	0h	8h
<p><b>3. Utilização do software Excel no tratamento dos dados</b></p> <p>1. Instruções básicas para uso do Software Excel;</p> <p>2. Entrada de dados;</p> <p>3. Cálculos básicos utilizando múltiplas células;</p> <p>4. Uso de funções prontas dos Excel;</p> <p>5. Funções estatísticas e algébricas mais importantes;</p> <p>6. Dicas e truques do Excel e compatibilidade com softwares equivalentes.</p>	4h	0h	4h	0h	8h
<p><b>4. Triagem de variáveis com planejamentos fatoriais completos</b></p> <p>1. Definição de variáveis e níveis quantitativos e qualitativos;</p> <p>2. Cálculos do número de experimentos a partir das variáveis e níveis;</p> <p>3. Planejamento de dois níveis;</p> <p>4. Montagem do planejamento e obtenção das respostas;</p> <p>5. Cálculos dos efeitos e interpretação dos resultados;</p> <p>6. Aplicação com estudos de caso.</p>	4h	0h	4h	0h	8h
<p><b>5. Triagem de variáveis com planejamento fatorial fracionário</b></p> <p>1. Importância de fracionar os planejamentos fatoriais completos;</p> <p>2. Como construir frações;</p> <p>3. Relações geradoras de fatoriais fracionários;</p> <p>4. Conceito de resolução;</p> <p>5. Triagem de variáveis;</p> <p>6. Aplicação com estudo de casos.</p>	4h	0h	4h	0h	8h
<p><b>6. Validação dos efeitos/coeficientes e ajuste de modelos empíricos</b></p> <p>1. Diferentes meios para estimativa de erro dos efeitos;</p> <p>2. Construção e análise do gráfico de probabilidade normal;</p> <p>3. Validação e interpretação dos efeitos e interação entre variáveis;</p> <p>4. Análise de variância, previsões, resíduos e validação de modelos;</p> <p>5. Uso do Excel para calcular efeitos, erros e realizar a análise estatística dos dados;</p>	4h	0h	4h	0h	8h

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <https://siadoc.ufv.br/validar-documento> com o código: 8U23.76BI.V9CO

6. Estudo de casos no Excel e software Statistica.					
<b>7. Metodologia de superfície de resposta e otimização de experimentos</b> 1. Planejamentos para superfície de resposta e otimização; 2. Como construir e escolher planejamentos para superfície de resposta; 3. Análise de variância, significância estatística e falta de ajuste dos modelos empíricos construídos; 4. Otimização usando múltiplas respostas; 5. Interpretação dos resultados;  6. Estudo de casos no Excel e software Statistica.	4h	0h	4h	0h	8h
<b>8. Planejamento experimental para misturas</b> 1. Modelos, avaliação dos modelos; 2. Pseudocomponentes, falta de ajuste; 3. Mistura com mais de três componentes; 4. Estudo de casos no software Statistica.	4h	0h	4h	0h	8h
<b>Total</b>	<b>32h</b>	<b>0h</b>	<b>28h</b>	<b>0h</b>	<b>60h</b>

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

Planejamento pedagógico	
Carga horária	Itens
Teórica	Apresentação de conteúdo oral e escrito em quadro convencional; Apresentação de conteúdo oral e escrito com o apoio de equipamento (projektor, quadro-digital, TV, outros); Apresentação de conteúdo utilizando aprendizado ativo; Apresentação de conteúdo pelos estudantes, mediado pelo professor; Seminários; Apresentação de videoaulas com instruções para uso de softwares; Apresentação de videoaulas com resolução de problemas usando softwares; e Apresentação de videoaulas com conteúdos complementares às aulas presenciais
Prática	<i>Não definidos</i>
Estudo Dirigido	Estudo dirigido e Resolução de problemas
Projeto	<i>Não definidos</i>
Recursos auxiliares	Computadores com software excel instalado

## QUI 314 - Planejamento e otimização de experimentos

### Bibliografias básicas

Descrição	Exemplares
BARROS NETO, B. de; SCARMINIO, I. S.; BRUNS, R. E. Como fazer experimentos: pesquisa e desenvolvimento na ciência e na indústria. 4 ed. Bookman: Porto Alegre:, 2010. 413 p	5
MONTGOMERY, D. C.; RUNGER, G. C. Estatística Aplicada e Probabilidade para Engenheiros. LTC: Rio de Janeiro, 2012; 521 p.	16
TEÓFILO, R. F.; FERREIRA, M. M. C., Quimiometria II: Planilhas eletrônicas para cálculos de planejamentos experimentais, um tutorial. Química Nova 2006, 29, (2), 338-350.	100

### Bibliografias complementares

Descrição	Exemplares
HINKELMANN, K.; KEMPTHORNE, O. Design and analysis of experiments. New York: John Wiley & Sons, 2005.	3
WALTERS, F.H.; PARKER, Jr. L.R.; MORGAN, S.L.; STANLEY, N.D. Sequential Simplex Optimization CRC. Florida: Press, Inc. Florida, 1991.	1
BOX, G. E. P., HUNTER, W. G., HUNTER, J. S., Statistics for Experimenters: Design, Innovation, and Discovery, 2 ed., John Wiley & Sons, 2005. 633 p.	2
BRERETON, R. G., Chemometrics: Data Analysis for the laboratory and chemical plant. John Wiley & Sons Inc: Chinchester, 2003; 407 p.	2