

UNIVERSIDADE ESTADUAL DO CENTRO-OESTE - UNICENTRO
Campus Universitário CEDETEG - Centro Universitário de Guarapuava
Setor de Ciências Exatas e de Tecnologia - SEET
Departamento de Química – DEQ

Curso: Química
Disciplina: Quimiometria
C/H semanal: 4 h/a

Série: 4
Turno: Integral
C/H total: 68 h/a

Ano: 2010
Código: 0972

EMENTA

Planejamento fatorial. Análise multivariada. Modelos empíricos. Modelagem de Misturas. Otimização Simplex.

I. OBJETIVOS

Aplicação de conhecimentos de estatística para análise de dados, planejamento e otimização de experimentos, propiciar noções básicas de métodos multivariados de análise de dados e mostrar suas aplicações em diferentes problemas químicos.

II. PROGRAMA

- 2.1 UMA REVISÃO DE ESTATÍSTICA
 - 2.1.1 Populações e distribuições de freqüências
 - 2.1.2 A distribuição normal
 - 2.1.3 Intervalos de confiança
 - 2.1.4 Teste t de Student
 - 2.1.5 Teste qui-quadrado
 - 2.1.6 Teste F
 - 2.1.7 Covariância e correlação
 - 2.1.8 Combinações lineares de variáveis aleatórias
 - 2.1.9 Aplicações em populações com distribuição normal
 - 2.1.10 Controle estatístico de processos
 - 2.1.11 Matrizes e operações com matrizes
- 2.2 PLANEJAMENTO DE EXPERIMENTOS
 - 2.2.1 Etapas de um estudo experimental
 - 2.2.2 Projetos fatoriais com dois níveis
 - 2.2.3 Projetos fracionados
 - 2.2.4 Cálculo dos efeitos
- 2.3 PROJETOS FATORIAIS 2^k
 - 2.3.1 As vantagens e limitações de um projeto 2^k
 - 2.3.2 A construção de um projeto 2^k
 - 2.3.3 Estimação dos efeitos e análise de variância
 - 2.3.4 Análise por meio de gráficos normais
 - 2.3.5 Blocagem em planejamentos fatoriais
 - 2.3.6 Aplicações
- 2.4 PROJETOS FATORIAIS 2^{k-p}
 - 2.4.1 As vantagens e limitações de um projeto 2^{k-p}
 - 2.4.2 O problema da confusão entre efeitos
 - 2.4.3 A construção de um projeto 2^{k-p}
 - 2.4.4 Estimação dos efeitos e ANOVA
- 2.5 MODELOS EMPÍRICOS
 - 2.5.1 Um modelo Linear
 - 2.5.2 Análise de variância
 - 2.5.3 Intervalos de confiança

- 2.5.4 Significância estatística da Regressão
- 2.5.5 Falta de ajuste e erro puro
- 2.5.6 Correlação e regressão
- 2.5.7 Aplicações

- 2.6 ANÁLISE MULTIVARIADA
 - 2.6.1 Definição do problema e organização dos dados
 - 2.6.2 Validação dos dados
 - 2.6.3 Visualização dos dados originais
 - 2.6.4 Transformação/Pre-processamento dos dados.
 - 2.6.5 Análise Exploratória dos dados
 - 2.6.6 Análise de Componentes Principais (PCA)
 - 2.6.7 Regressão por Componentes principais e por Mínimos Quadrados parciais (PCR, PLS).

- 2.7 MODELAGEM DE MISTURAS
 - 2.7.1 Misturas de dois componentes
 - 2.7.2 Misturas de três componentes
 - 2.7.3 Avaliação dos modelos
 - 2.7.4 Aplicações

- 2.8 OTIMIZAÇÃO SIMPLEX

III. METODOLOGIA DE ENSINO

Aulas expositivas teóricas, seminários e aulas práticas individuais utilizando computador.

IV. FORMAS DE AVALIAÇÃO

Prova escrita, lista de exercícios, trabalhos no computador, seminário, defesa oral de exercícios e trabalho

V. BIBLIOGRAFIA

.5.1 BÁSICA

BARROS-NETO, B., SCARMINIO, I. S., BRUNS, R. E. – Como fazer experimentos. 2 ed. Campinas: Editora da UNICAMP, 2007.

5.2. COMPLEMENTAR

BARBETTA, P. A.; REIS, M. M. e BORNIA, A. C. – Estatística para Cursos de Engenharia e Informática. São Paulo: Editora Atlas, 2004.

JAIN, R. The art of computer systems performance analysis: techniques for experimental design, measurement, simulation, and modeling. USA: John Wiley, 1991.

MONTGOMERY, D. C. – Design and analysis of experiments. 6 ed. USA: John Wiley, 2005.

MONTGOMERY, C. D. E RUNGER, G. C. – Estatística Aplicada e Probabilidade para Engenheiros. 2 ed. Rio de Janeiro – LTC, 2003.

Artigos técnicos sobre quimiometria.

Professor(a) responsável pela disciplina:

Prof. Ricardo Celeste

Aprovado em __/__/2010

Ata nº ____, **Folha nº** ____, **Livro nº** ____

Chefe do Departamento: Marcos Roberto da Rosa

Nome do professor:

