

PROGRAMA DA DISCIPLINA

CÓDIGO: CTQ-009

DISCIPLINA: Tópicos Avançados em Energia (**Quimiometria: Planejamento de Experimentos e Análise Multivariada**).

DOCENTES RESPONSÁVEIS: Bruno Guzzo da Silva, Mónica B. M. López.

CARGA HORÁRIA: 24 h

TPI: (2-0-2)

EMENTA:

Tipos e classificações de planejamentos fatoriais. Delineamento Composto Central Rotacional (DCCR). Conceitos básicos e aplicação de abordagens multivariadas no processamento de grandes volumes de dados químicos. Aplicações de análise exploratória e calibração multivariada.

PROGRAMA:

Parte 1 - Planejamento de Experimentos. Docente: Bruno Guzzo da Silva. Carga horária: 12 h.

a) Introdução: importância do uso de uma metodologia científica em processos multivariáveis; vantagens dos experimentos fatoriais em relação aos experimentos do tipo um fator por vez.

b) Tipos e classificações de planejamentos fatoriais: definição das variáveis independentes e dependentes do processo e das faixas de estudo de cada uma delas; estratégia da definição do planejamento mais adequado segundo o processo e o número de variáveis envolvidas.

c) Delineamento Composto Central Rotacional (DCCR) ou Planejamento Estrela: ajuste de modelos empíricos não-lineares aos dados experimentais; análise da qualidade de ajuste do modelo por meio da Análise de Variância (ANOVA); construção das superfícies de resposta e das curvas de nível para os modelos validados estatisticamente; determinação das condições operacionais ótimas pela análise de superfície de resposta e curva de contorno.

SOFTWARE: Protimiza Experimental Design.

Parte 2 - Análise Multivariada. Docente: Mónica B. M. López. Carga horária: 12 h.

a) Tipos de dados e sua visualização;

b) Métodos de reconhecimento de padrões: Análise de Componentes Principais (PCA, *Principal Component Analysis*);

c) Pré-processamento de dados;

d) Calibração multivariada: Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS, *Partial Least Squares*);

e) Aplicação em dados químicos reais usando programas computacionais.

SOFTWARE: Matlab (Licença da Ufabc), GNU Octave (*free*). **Obs: Não é indispensável ter conhecimento prévio no uso destes programas.**

FORMA DE AVALIAÇÃO:

Parte 1 (50% do conceito final): Elaboração de projeto (escrito e apresentação) com aplicação de um planejamento fatorial de experimentos.

Parte 2 (50% do conceito final): Apresentação da aplicação de um dos métodos estudados em um conjunto de dados real.

BIBLIOGRAFIA:

RODRIGUES, M. I.; IEMMA, A. F. **Planejamento de experimentos e otimização de processos**. 3. ed. Campinas: Cárita, 2014.

BARROS NETO, B.; SCARMINO, I.S.; BRUNS, R.E. **Como Fazer Experimentos: Pesquisa e Desenvolvimento na Ciência e na Indústria**. Campinas: Editora da Unicamp, 2001.

FERREIRA, M. M. C. **Quimiometria: Conceitos, métodos e Aplicações**. Ed. UNICAMP, 2015.

BRERETON, R. G. **Applied Chemometrics for Scientists**. John Wiley & Sons, Ltd. 2017.