



Universidade Estadual de Maringá  
Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas



## PROGRAMA DA DISCIPLINA

**Disciplina Eletiva:** Quimiometria: Planejamento, Modelagem Empírica e Otimização de Experimentos.

Código: DFA 4020      C.H: 60 horas/aula      Créditos: 02 Teóricos e 01 Prático

Ano de Aprovação: 2016

Professor: Adriano Valim Reis

Departamento de Farmácia

### 1. EMENTA:

Introdução à quimiometria, planejamentos experimentais, construção de modelos empíricos, metodologia de superfície de resposta, planejamentos de misturas de componentes, atividades em softwares específicos.

### 2. OBJETIVO:

Fornecer ao discente conhecimento teórico-prático de técnicas e métodos de planejamento, modelagem empírica e otimização de seus experimentos.

### 3. PROGRAMA:

#### **Conteúdo Teórico – Sala de aula**

1.Introdução a Quimiometria.

2.Planejamento experimental.

2.1. Princípios básicos (Grau de liberdade, Análise de variância, falta de ajuste, etc.);

2.2. Planejamento Fatorial Completo;

2.3. Planejamento Fatorial Fracionário;

2.4. Planejamento Plackett–Burman;

2.5. Planejamento Taguchi (matriz orthogonal);

3.Construção de modelos empíricos.

4.Metodologia de Superfície de Resposta.

4.1. Planejamento com ponto central (ou composto central);

4.2. Planejamento Box-Behnken;

5.Planejamento/ modelagem de misturas de componentes.

5.1.Otimização Simplex;

## Conteúdo Prático - Atividades em laboratório de informática

1. Apresentar os principais softwares utilizados em Quimiometria;
2. Preparar diversos planejamentos experimentais em softwares (*p. ex.*, Action<sup>®</sup>, Statistic<sup>®</sup>, Minitab<sup>®</sup>, MicrOsiris);
3. Utilizar conjuntos de dados de experimentos em softwares específicos e realizar análises estatísticas, gráficos, entre outros recursos disponíveis nos softwares;
  - 3.1 Utilizar dados e equações para elaborações de gráficos de Superfície de Resposta utilizando os softwares GeoGebra e Scilab.

## 4. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BRUNS, R. E.; BARROS NETO, B.; SCARMINIO, I. S. **Como fazer experimentos: Pesquisa e desenvolvimento na ciência e na indústria**. 4ª edição. Bookman Companhia Ed. 2010, 414 p.
- BRERETON, R.G; **Chemometrics: data analysis for the laboratory and chemical plant**. John Wiley & Sons, 2003, 504 p.
- GEMPERLINE P. J.; **Practical Guide to Chemometrics**. Taylor & Francis Group, Boca Raton, 2006, 520 p.
- HAIR, J. F.; ANDERSON, ROLPH E.; TATHAM, RONALD L.; BLACK, WILLIAM C.; BABIN, BARRY J. **Análise multivariada de dados**. 6ª edição, Bookman Companhia Ed., 2009, 688 p.
- MANLY, B.F.J., **Métodos Estatísticos Multivariados**, uma Introdução, 3ª. ed., Bookman, Porto Alegre, 2008, 229p.

## 5. VERIFICAÇÃO DE APRENDIZAGEM

1ª nota: será atribuída a uma nota referente à participação dos alunos em sala de aula, valendo de 0,0 (zero) a 10,0 (dez) e peso 1.

2ª nota: será atribuída a uma avaliação prática, valendo de 0,0 (zero) a 10,0 (dez) e peso 2.

Nota média final: será a média aritmética simples das duas avaliações.

**Aprovado na 100ª/15 Reunião do  
Conselho Acadêmico do Programa de  
Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas,  
realizada no dia 09.11.15**