



UNIVERSIDADE FEDERAL DE VIÇOSA
PRÓ REITORIA DE ENSINO
DIRETORIA DE REGISTRO ESCOLAR

Programa Analítico de Disciplina

QUI314 Otimização em Química

Departamento de Química - Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas

Número de créditos: 4		<u>Teóricas</u>	<u>Práticas</u>	<u>Total</u>
Duração em semanas: 15	Carga horária semanal	2	2	4
Períodos - oferecimento: I	Carga horária total	30	30	60

Pré-requisitos (Pré ou co-requisitos)*

QUI310 e EST105

Ementa

Introdução à otimização. Cálculo dos efeitos. Planejamento fatorial fracionário. Modelos empíricos. Planejamento experimental para misturas. Otimização simplex.

Oferecimento aos Cursos

Curso	Modalidade	Período
Licenciatura em Química(LIC)	Optativa	-
Química(BAC)	Optativa	-
Química(LIC)	Optativa	-



UNIVERSIDADE FEDERAL DE VIÇOSA
PRÓ REITORIA DE ENSINO
DIRETORIA DE REGISTRO ESCOLAR

QUI314 Otimização em Química

Seq	Aulas Teóricas	Horas/Aula
1	Introdução à otimização 1.1. Planejamento fatorial 2^n	2
2	Cálculo dos efeitos 2.1. Interpretação dos resultados 2.2. Cálculo dos erros 2.3. Aplicação (exemplos numéricos)	5
3	Planejamento fatorial fracionário 3.1. Como construir frações 3.2. Relações geradoras de fatoriais fracionários 3.3. Conceito de resolução 3.4. Triagem de variáveis 3.5. Aplicação (exemplos numéricos)	6
4	Modelos empíricos 4.1. Análise de variância, intervalos de confiança 4.2. Significância estatística, falta de ajuste 4.3. Metodologia de superfícies de resposta	6
5	Planejamento experimental para misturas 5.1. Modelos, avaliação dos modelos 5.2. Pseudocomponentes, falta de ajuste 5.3. Mistura com mais de três componentes	7
6	Otimização simplex 6.1. Simplex básico 6.2. Simplex modificado supermodificado 6.3. Critérios de otimização	4



UNIVERSIDADE FEDERAL DE VIÇOSA
PRÓ REITORIA DE ENSINO
DIRETORIA DE REGISTRO ESCOLAR

QUI314 Otimização em Química

QUI314 Otimização em Química

Seq	Aulas Práticas	Horas/Aula
1	Otimização do método do tiocianato para determinação de Fe(III). Planejamento Fatorial completo com três fatores 2 ³ (X1 = ácido clorídrico, X2 = persulfato de sódio e X3 = tiocianato de potássio)	4
2	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)	4
3	Superfície de resposta com dois fatores com um ponto central. Fatores (Z1 = sulfato férrico e Z2 = sulfato de alumínio). Coprecipitação do corante Azul Benzathren	4
4	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)	5
5	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 de Fe(III)	4
6	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)	5
7	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)	4



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE VIÇOSA
PRÓ REITORIA DE ENSINO
DIRETORIA DE REGISTRO ESCOLAR**

QUI314 Otimização em Química

Referências Bibliográficas

Bibliografia Básica:

1 - BRUNS, ROY EDWARD, BARROS NETO, B.; SCARMINIO, I.S. Planejamentos e otimização de experimentos. Editora da UNICAMP, 1995. [Exemplares disponíveis: 20]

Bibliografia Complementar:

2 - HINKELMANN, K.; KEMPTHORNE, O. Design and analysis of experiments. New York: John Wiley & Sons, 2005. [Exemplares disponíveis: 3]

3 - MONTGOMERY, D.C. Design and analysis of experiments. New York, Wiley, 2005. [Exemplares disponíveis: 3]

4 - MYERS, R.H. Response Surface. New York: Wiley, 1995. [Exemplares disponíveis: 3]

5 - Periódicos:

Chemometrics

Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems

Journal of Quality Technology

Technometric [Exemplares disponíveis: Não informado.]

6 - WALTERS, F.H.; PARKER, Jr. L.R.; MORGAN, S.L.; STANLEY, N.D. Sequential Simplex Optimization CRC. Florida: Press, Inc. Florida, 1991. [Exemplares disponíveis: 1]