



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA  
INSTITUTO DE QUÍMICA  
CURSO DE QUÍMICA INDUSTRIAL

FICHA DE DISCIPLINA

DISCIPLINA: MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO EM QUÍMICA

CÓDIGO: GQB062

UNIDADE ACADÊMICA: INSTITUTO DE QUÍMICA

PERÍODO:

CH TEÓRICA:

CH PRÁTICA:

CH TOTAL:

OBRIGATORIA:

OPTATIVA:

45

00

45

( )

( X )

PRÉ-REQUISITOS:

CÓ-REQUISITOS:

OBJETIVOS

Selecionar e conduzir métodos de otimização em procedimentos químicos.

EMENTA

Método clássico de otimização; Método simplex; Método do planejamento fatorial; Método de análise de superfície de resposta.

DESCRIÇÃO DO PROGRAMA

1- INTRODUÇÃO

1.1-Otimização

1.2-Otimização em química

1.3-Superfícies de resposta

1.4—Estágios de um procedimento de otimização

2- MÉTODO UNIVARIADO

2.1-Univariado a passo constante

2.2-Univariado a passo variável

2.3-Vantagens e desvantagens do procedimento

### 3-MÉTODO SIMPLEX

3.1-Simplex básico

3.1.1-Definição de simplex e suas regras de movimentação

3.1.2-Localização e tamanho do simplex inicial

3.1.3-Aplicações do procedimento

3.1.4-Limitações do simplex básico

3.2-Simplex modificado

3.2.1-Regras de movimentação

3.2.2-Aplicações do procedimento

3.2.2.-Vantagens e desvantagens

### 4-MÉTODO DO PLANEJAMENTO FATORIAL

4.1-Princípio da metodologia

4.2-Deficiências do planejamento fatorial

4.3-Construção do planejamento fatorial saturado

4.4-Cálculo dos efeitos das variáveis e de suas interações

4.5-Cálculo do desvio padrão dos efeitos

4.6-Interpretação dos efeitos do planejamento fatorial

4.7-Planejamento fatorial fracionado, meia fração

4.8-Fatorial EVOP - evolutionary operation

### 5-MÉTODO DE ANÁLISE DE SUPERFÍCIE DE RESPOSTAS

5.1-Princípio da metodologia

5.2-Escalonamento das variáveis

5.3-Planejamento fatorial de primeira ordem e seu modelo matemático

5.4-Interpretação do modelo de primeira ordem

5.5-Caminho da ascensão máxima

5.6-Planejamento fatorial para modelo matemático de segunda ordem

5.7-Interpretação do modelo de segunda ordem

5.8-Aplicações da metodologia

## BIBLIOGRAFIA

### BÁSICA:

B. BARROS NETO; I.S. SCARMÍNIO e R.E. BRUNS. Como Fazer Experimentos: Pesquisa e desenvolvimento na ciência e na indústria. Editora da UNICAMP, Campinas, 2001.

G.E.P. BOX; W.G. HUNTER and J.S.HUNTER. Statistics for experimenters: An introduction to design, data analysis and model building. John Wily & Sons, New York, 1978.

LEITE, F. Validação em análise química: conceitos, repê, reprô, estatística, calibrações. 3ª ed. Campinas, SP: Atomo, 1998.

### COMPLEMENTAR:

EIRAS, S.P.; COSCIONE, A.R.; de ANDRADE, J.C. e CUSTÓDIO, R.. Métodos de otimização em química, [http://www.chemkeys.com/bra/md/peeo\\_6/mdoeq\\_1/mdoeq\\_1.htm](http://www.chemkeys.com/bra/md/peeo_6/mdoeq_1/mdoeq_1.htm) , última atualização MAR/2000.

MINGOTI, S. A.. Análise de dados através de métodos de estatística multivariada. Uma abordagem aplicada. 1ª ed., Editora UFMG. Belo Horizonte, 2007.

## APROVAÇÃO

03/12/2010

Universidade Federal de Uberlândia  
Coordenação do Curso de Química Industrial

Wellington de Oliveira Cruz

Prof. Dr. Wellington de Oliveira Cruz

Coordenador do Curso de Química Industrial

Portaria R nº 715/10

03/12/2010

Universidade Federal de Uberlândia  
Prof. Manuel Gonzalo Hernandez Terrones  
Diretor do Instituto de Química

Prof. Dr. Manuel Gonzalo Hernandez Terrones

Diretor do Instituto de Química

Portaria R nº 473/2006