

Ficha de Unidade Curricular LEQB – A3ES

1. Caracterização da Unidade Curricular.

1.1. Designação da unidade curricular (1.000 carateres).
Estatística e Quimiometria / Statistics and Chemometrics

1.2. Sigla da área científica em que se insere (100 carateres).
MAT/CEE

1.3. Duração¹ (100 carateres).
Semestral

1.4. Horas de trabalho² (100 carateres).
135 h

1.5. Horas de contacto³ (100 carateres).
Total: 60 h
T: 30 h TP: 30 h

1.6. ECTS (100 carateres).
5.0

1.7. Observações⁴ (1.000 carateres).

1.7. Remarks (1.000 characters).

2. Docente responsável e respetiva carga letiva na Unidade Curricular (preencher o nome completo) (1.000 carateres).
Nelson Alberto Frade da Silva (30 h)

3. Outros docentes e respetivas cargas letivas na unidade curricular (1.000 carateres).
Paulo José Raimundo Ramos (30 h)

4. Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes) (1.000 carateres).

Nesta UC, os estudantes deverão consolidar os seus conhecimentos de estatística e quimiometria e aplicá-los no tratamento de resultados/dados obtidos em análise química. Os estudantes deverão ser capazes de:

1. Analisar estatisticamente séries de dados experimentais obtidas em processos analíticos laboratoriais, fabris ou de campo.
2. Eliminar, através dos testes estatísticos, dados aberrantes e comparar conjuntos de dados.
3. Efetuar a propagação de erros associados aos dados analíticos e efetuar regressões e correlações acompanhadas da propagação de erros.
4. Calcular incertezas associadas a procedimentos analíticos seguindo os métodos internacionalmente aceites.
5. Aplicar a conjuntos de dados complexos a análise de variância para comparação das médias. Dotados das ferramentas estatísticas descritas, os alunos deverão, no final da UC, ser capazes de proceder à validação e reporte de métodos analíticos com base nos procedimentos internacionais de referência.

4. Intended learning outcomes (knowledge, skills, and competences to be developed by the students) (1.000 characters).

In this UC students should consolidate their knowledge of statistics and chemometrics and apply them in chemical analysis data treatment. Students should be able to:

1. To statistically analyse series of experimental data obtained in laboratorial, factory or field analytical processes.
2. Eliminate, through statistical tests, aberrant data and compare data sets.
3. To propagate errors associated with analytical data and to perform regressions and correlations

accompanied by the propagation of errors.

4. Calculate uncertainties associated with analytical procedures following internationally accepted methods.
5. Apply to complex data sets the analysis of variance for comparison of the means. Endowed with the statistic tools described, students should, at the end of the CU, be able to carry out the validation and reporting of analytical methods based on international reference procedures.

5. Conteúdos programáticos (1.000 carateres).

1. Modelos teóricos unidimensionais: uniforme, triangular, normal.
2. Medidas de estatística descritiva: média, variância, desvio padrão, coeficiente de variação.
3. Amostragem e distribuições amostrais. Estimação pontual e por intervalos de confiança.
4. Testes de qualidade de ajuste: testes de Kolmogorov-Smirnov-Lilliefors e de Shapiro-Wilk. Testes para outliers: testes de Dixon e de Grubbs.
5. Testes de hipóteses paramétricos: valor médio, variância, diferença de valores médios, quociente de variâncias.
6. Correlação e regressão linear simples: diagrama de dispersão, coeficientes de correlação e de determinação. Modelo de regressão linear simples. Inferência.
7. Testes de homocedasticidade: testes de Levene e de Bartlett. Análise de variância.
8. Propagação de erros em medições analíticas.
9. Cálculo de incertezas: tipos e fontes de incerteza, incerteza combinada, incerteza expandida.
10. Validação de métodos analíticos: parâmetros de validação, protocolo, ensaios e critérios de validação.

5. Syllabus (1.000 characters).

1. Continuous probability distributions: uniform, triangular and normal.
2. Descriptive statistics: mean, variance, standard deviation and coefficient of variation.
3. Sampling and sample distributions. Point and confidence interval estimation.
4. Tests of normality: Kolmogorov-Smirnov-Lilliefors and Shapiro-Wilk tests. Tests for outliers: Dixon and Grubbs tests.
5. Parametric tests of hypotheses: mean, variance, difference in means, ratio of two variances.
6. Simple linear regression and correlation: Scatter diagram, sample correlation coefficient, coefficient of determination. Simple linear regression model. Inference.
7. Tests for homogeneity of variance: Levene and Bartlett tests. Analysis of variance.
8. Error propagation in analytical assays.
9. Uncertainty calculation: types of uncertainty, uncertainty sources, combined and expanded uncertainty.
10. Analytical methods validation: validation parameters, validation protocol, validation tests and validation criteria.

6. Demonstração da coerência dos conteúdos programáticos com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular (1.000 carateres).

A identificação dos modelos teóricos e cálculo de probabilidades associadas será suportada no conteúdo do ponto 1. Modelos teóricos unidimensionais. A capacidade de seleção e análise de conjuntos de dados e dados de ensaios analíticos será suportada no ponto 3. Estimação por intervalos, 4. Teste de ajuste. Testes aos outliers e 5. Testes de hipótese paramétricos. A propagação de erros em procedimentos e ensaios analíticos, a regressão e correlação de dados será suportada no ponto 8. Propagação de erros em medições analíticas e 6. Correlação e regressão linear. O ponto 9. Cálculo de incertezas, suportará a realização de cálculos de propagação de incertezas em procedimentos e ensaios analíticos. A análise de variância de conjuntos de dados complexos será suportada nos conteúdos do ponto 7. Análise de Variância. A validação de métodos analíticos, de acordo com procedimentos internacionalmente aceites será suportada nos conteúdos do ponto 10. Validação de métodos analíticos.

6. Evidence of the syllabus coherence with the curricular unit's intended learning outcomes (1.000 characters).

Identification of theoretical models and calculation of associated probabilities will be supported in the contents of point 1. Continuous probability distributions. The ability to select and analyse data sets and analytical assays data sets will be supported in contents of points: 3. Interval estimation, 4. Adjustment test. Tests for outliers and 5. Parametric hypothesis testing. Error propagation in analytical procedures and assays, data regression and

correlation will be supported in points 8. Error propagation in analytical assays and 6. Correlation and linear regression. Point 9. Uncertainty calculations will support the ability to carry out uncertainty propagation calculations in analytical procedures and tests. The analysis of variance of complex data sets will be supported in contents of point 7. Analysis of variance. The validation of analytical methods according to internationally accepted procedures will be supported in contents of point 10. Analytical methods validation.

7. Metodologias de ensino (avaliação incluída) (1000 carateres).

Os conteúdos da UC são transmitidos de modo expositivo/interativo suportados pela utilização de folhas de cálculo e *software* estatístico R. Os conceitos lecionados são exemplificados com dados reais e tipificados, tratados pelos alunos nas máquinas de calcular/tablets/computadores.

A avaliação distribuída (AD) será efetuada com realização de uma ficha (F1) e um teste (TE1) para o módulo de estatística e uma ficha (F2) e um teste (TE2) para o módulo de quimiometria.

Na AD, sem realização de exames parciais nas épocas de recurso e especiais, a classificação mínima dos testes é de 8,00 valores com uma média ponderada de 9,50 valores.

As fichas não têm classificação mínima, mas o mínimo de cada módulo é de 8,00 valores.

Nota Final (NF): $NF=(0,10F1+0,40TE1)+(0,10F2+0,40TE2)$ com $NF \geq 9,50$ valores.

Os alunos que faltarem às avaliações durante a AD realizarão Exame Final (EF).

A classificação mínima do exame final é de 9,50 valores.

Exame final: $NF=1,00 \times EF$.

7. Teaching methodologies (including assessment) (1.000 characters).

The UC contents are transmitted in interactive/expository mode supported by spreadsheets and statistical software R. Concepts are typified with real examples data, treated by the students using calculators/tablets/computers.

The distribute evaluation (DE) during the academic period will be assessed by an exercise (WF1) and a test (WT1) in the statistics module and an exercise (WF2) and a test (WT2) in the chemometrics module.

In the DE, without partial exams in the appeal and special periods, the minimum classification of the tests is 8.00 values with a weighted average of 9.50 values.

The exercises don't have a minimum classification but the minimum classification in each module must be 8.00 values. Final Mark (FM): $FM=(0.10WF1+0.40WT1) + (0.10WF2+0.40WT2)$ with $FM \geq 9.50$ values

Students who fail the DE during the academic period will be evaluated by a final exam (FE).

The minimum classification of the final exam is 9.50 values.

Final exam: $FM=1.00 \times FE$.

8. Demonstração da coerência das metodologias de ensino com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular (3.000 carateres).

As matérias teóricas serão expostas aos alunos sempre suportadas em exemplos demonstrativos reais. Ser também dinamizada a reflexão crítica dos alunos de modo que se apropriem e interiorizem os conceitos lecionados. Considerando que os objetivos desta UC contemplam uma componente prática importante, as metodologias são suportadas em abordagens também iminentemente práticas e de execução pelos próprios alunos. Será priorizada a execução de exercícios com dados reais que sejam representativos da aplicação da quimiometria nas atividades de um Engenheiro Químico. A resolução de problemas reais será executada com suporte a meios informáticos com o objetivo de simular a atividade real que os alunos encontrarão nas suas atividades profissionais. Os problemas apresentados irão aumentar de complexidade ao longo de semestre para que no final os alunos possam ser confrontados com a resolução de casos reais e concretos.

8. Evidence of the teaching methodologies coherence with the curricular unit's intended learning outcomes (3.000 characters).

The theoretical subjects will be exposed to the students always supported in real demonstrative examples. The critical reflection of the students will also be stimulated in order to appropriate and internalize the concepts taught. Considering that the objectives of this CU include an important practical component, the methodologies are supported in approaches also imminently practical and of execution by the students themselves. Priority will be given to the execution of exercises with real data that are representative of the application of chemometrics in the activities of a Chemical Engineer. The resolution of real problems will be carried out with support to computer means with the aim of simulating the real activity that the students will find in their professional

activities. The problems presented will increase in complexity during the semester so that in the end students can be confronted with the resolution of real concrete cases.

9. Bibliografia de consulta/existência obrigatória (1.000 carateres).

1. Montgomery, D., C., & Runger, G. C. (2013). *Applied Statistics and Probability for Engineers* (7th ed). John Wiley & sons.
2. Miller, J. (2018). *Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry* (7th ed). Pearson Education.
3. Massart, D., Vandeginste, B., Deming, S., Michotte, Y., & Kaufman L. (2003). *Chemometrics: a textbook*. Elsevier.
4. Barwick, V. (2016). *Eurachem/CITAC Guide: Guide to Quality in Analytical Chemistry: An Aid to Accreditation* (3rd ed.). CITAC.
5. Brereton, R. (2003). *Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant*. John Wiley & Sons.
6. Livingstone, D. (2009). *Practical Guide to Scientific Data Analysis*. John Wiley & Sons.
7. Magnusson, B., & Örnemark, U. (2014). *Eurachem Guide: The Fitness for Purpose of Analytical Methods – A Laboratory Guide to Method Validation and Related Topics* (2nd ed.). Eurachem.
8. Holler, F., & Crouch, S. (2013). *Applications of Microsoft® Excel in Analytical Chemistry* (2nd ed). Brooks Cole.

¹ Anual, semestral, trimestral, ...

² Número total de horas de trabalho.

³ Discriminadas por tipo de metodologia adotado (T - Ensino teórico; TP - Ensino teórico-prático; PL - Ensino prático e laboratorial; TC - Trabalho de campo; S - Seminário; E - Estágio; OT - Orientação tutorial; O - Outro).

⁴ Assinalar sempre que a unidade curricular seja optativa.