instituto superior de engenharia de lisboa

Ficha de Unidade Curricular A3ES
Estatística e Quimiometria
Licenciatura em Engenharia Química e Biológica

2025-26

1. Designação da unidade curricular

[4092] Estatística e Quimiometria / Statistics and Chemometrics

2. Sigla da área científica em que se insere	CEE, MAT
3. Duração	Unidade Curricular Semestral
4. Horas de trabalho	135h 00m
5. Horas de contacto	Total: 60h 00m das quais T: 30h 00m | TP: 30h 00m
6. % Horas de contacto a distância	Sem horas de contacto à distância
7. ECTS	5
8. Docente responsável e respetiva carga letiva na Unidade Curricular	[1501] Nelson Guerreiro Cortez Nunes | Horas Previstas: N/D
9. Outros docentes e respetivas cargas letivas na unidade curricular	Não existem docentes definidos para esta unidade curricular

10. Objetivos de aprendizagem e a sua compatibilidade com o método de ensino (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes).

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.

10. Intended Learning objectives and their compatibility with the teaching method (knowledge, skills and competences by the students).

In this CU 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.

11. Conteúdos programáticos

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.

11. Syllabus

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.

12. Demonstração da coerência dos conteúdos programáticos com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular

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.

12. Evidence of the syllabus coherence with the curricular unit´s intended learning outcomes

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. Analytica methods validation.

13. Metodologias de ensino e de aprendizagem específicas da unidade curricular articuladas com o modelo pedagógico

O ensino da unidade curricular assenta em aulas teóricas e teórico-práticas. As aulas teóricas são constituídas por sessões de exposição da matéria relativa aos vários conteúdos programáticos da unidade curricular. Nas aulas teórico-práticas são apresentados exemplos concretos com aplicação dos conceitos lecionados nas aulas teóricas, utilizando dados experimentais reais e tipificados, tratados pelos alunos nas suas máquinas de calcular, tablets e computadores, suportados através da utilização de folhas de cálculo (Excel) e software estatístico dedicado como o SPSS ou R. Todos os conteúdos e exemplos serão transmitidos de modo expositivo e interativo, visando uma dinâmica de interação com os alunos, incentivando-os a refletir e debater os temas e exemplos apresentados.

13. Teaching and learning methodologies specific to the curricular unit articulated with the pedagogical model

The teaching of the curricular unit is based on theoretical and theoretical-practical classes. Theoretical classes consist of sessions where the various syllabus contents of the curricular unit are presented to the students. In the theoretical-practical classes, concrete examples are presented with the application of the concepts taught in the theoretical classes, using real and typified experimental data, processed by the students on their calculators, tablets and computers, supported by the use of spreadsheets such as Excel and dedicated statistical software such as SPSS or R. All content and examples will be transmitted in an expository and interactive way, aiming at a dynamic interaction with the students, encouraging them to reflect and debate the themes and examples presented.

14. Avaliação

A avaliação distribuída (AD) será efetuada através da realização de uma ficha (F1) e um teste (T1) para o módulo de estatística e uma ficha (F2) e um teste (T2) para o módulo de quimiometria.
Na AD, a classificação mínima dos testes (T1 e T2) é de 8,00 valores com uma média ponderada mínima de 9,50 valores. Caso não tenha sido obtida classificação mínima no T1 ou T2, este pode ser realizado em regime de exame parcial na data de época normal.
As fichas F1 e F2 não têm classificação mínima, mas o mínimo de cada módulo é de 8,00 valores.
Classificação final (CF) por avaliação distribuída: CF = (0,10 x F1 + 0,40 x T1) + (0,10 x F2 + 0,40 x T2), com CF ? 9,50 valores.
Em alternativa, a avaliação por exame final (EF) substitui a avaliação distribuída.
A classificação mínima do exame final (EF) é de 9,50 valores.
Classificação Final (CF) por exame: CF= 1,0xEF, com CF ? 9,50 valores.

14. Assessment

The distribute evaluation (DE) during the academic period will be assessed by an exercise (E1) and a test (T1) in the statistics module and an exercise (E2) and a test (T2) in the chemometrics module.
In the DE the minimum classification of the tests (T1 and T2) is 8.00 values with a weighted average of 9.50 values. If the minimum classification in T1 or T2 is not achieved, a partial exam can be realized in the normal exam date.
The exercises E1 and E2 don´t have a minimum classification but the minimum classification in each module is 8.00 values. Final classification (FC) by distributed evaluation: FC = (0.10 x E1 + 0.40 x T1) + (0.10 x E2 + 0.40 x T2) with FC ?¿ 9.50 values. Alternatively, evaluation by a Final Exam (FE) replaces the distributed evaluation.
The minimum classification of the final exam (FE) is 9.50 values.
Final classification (FC) by exam: FC= 1.0xFE, with FC ?¿ 9.50 values.

15. Demonstração da coerência das metodologias de ensino com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular

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 uma Engenheiro Químico. A resolução de problemas reais será executada co suporte a meios informáticos com o objetivo de simular a atividade real que os alunos encontrarão nas suas atividades profissionais. Os problemas apresentados irão aumentado de complexidade ao longo de semestre para que no final os alunos possam ser confrontados com a resolução de casos reais e concretos.

15. Evidence of the teaching methodologies coherence with the curricular unit´s intended learning outcomes

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.

16. Bibliografia de consulta/existência obrigatória

1. Montgomery, D., C., & Runger, G. C. (2013). Applied Statistics and Probability for Engineers (7 th ed). John Wiley & sons.
2. Miller, J. (2018). *Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry* (7 th 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* (3 rd ed.) .
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* (2 nd ed.).
8. Holler, F., & Crouch, S. (2013). Applications of Microsoft® Excel in Analytical Chemistry (2nd ed). Brooks Cole.

17. Observações

Unidade Curricular Obrigatória

Data de aprovação em CTC: 2025-07-30

Data de aprovação em CP: 2025-07-29