

Planilhas eletrônicas para cálculos de planejamentos experimentais: uma proposta para o ensino de quimiometria.

Reinaldo F. Teófilo* (PG), Roy E. Bruns (PQ), Márcia M.C. Ferreira (PQ). teofilo@iqm.unicamp.br

Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas

Palavras Chave: Planilhas eletrônicas, planejamentos experimentais

Introdução

Atualmente, com o advento acelerado dos meios computacionais, cálculos muitas vezes simples podem ficar mascarados quando realizados por pacotes computacionais complexos. Os planejamentos fatoriais, por exemplo, exigem, após a sua execução, cálculos simples, mas muitas vezes tediosos devido à grande quantidade de dados a serem processados. A grande maioria dos estudantes aprende a utilizar softwares que realizam tais cálculos, mas sem o interesse e estímulo para entender como os mesmos são realizados.

A importância do entendimento dos processos realizados pelos softwares é fundamental para o questionamento e avaliação dos resultados obtidos, bem como para a crítica da maneira como tais softwares realizam os mesmos.

Há no mercado diversos tipos de softwares que realizam cálculos de planejamentos experimentais, sendo os softwares Statistica, Unscrambler e Design Expert, os mais utilizados. Tais programas, no entanto, não são gratuitos e muitas vezes processam resultados complicados de serem entendidos por um pesquisador inexperiente. Ao contrário, a planilha eletrônica, já bastante difundida e conhecida, é uma importante ferramenta para realizar tais cálculos, além de existir versões gratuitas e serem práticas no sentido de visualização dos cálculos realizados com os dados inseridos na mesma.

A montagem dos cálculos dentro de uma planilha eletrônica poderá ter um papel estimulante e promover o interesse pela quimiometria, afinal, o estudante estará vendo em detalhes como os mesmos se processam.

O objetivo deste trabalho foi desenvolver planilhas eletrônicas baseadas no software Excel XP[®] da Microsoft[®], de maneira a realizar cálculos de efeitos e erros dos efeitos para planejamento fatoriais de dois níveis com 2 a 7 variáveis, além de planilhas para cálculo dos coeficientes de modelos baseados nos principais planejamentos para superfície de resposta, erros dos coeficientes, análise de variância do modelo e gráfico dos resíduos.

Todos os cálculos e gráficos foram validados pelo software Statistica 6.0.

Resultados e Discussão

A planilha mostrou-se viável para realizar os seguintes cálculos para o planejamento fatorial:

-Efeitos (principais e interação);

-Variância global;

-Erros dos efeitos a partir de repetições e a partir dos efeitos de altas ordens, caso não haja repetições;

-Graus de liberdade do planejamento;

-Avaliação e distinção dos efeitos significativos.

Para as superfícies de resposta, os planejamentos: fatorial com ponto central, estrela e composto central foram escolhidos, considerando-os como os mais importantes, além disso, para cada um destes planejamentos avaliaram-se os modelos linear e quadrático.

Para estes planejamentos, a planilha mostrou-se viável para os cálculos de:

-Coeficientes;

-Valores estimados pelo modelo;

-Erros dos coeficientes;

-Avaliação e distinção dos coeficientes significativos;

-Análise de variância do modelo;

-Gráfico dos resíduos.

Todos os cálculos de matrizes e equações podem ser visualizados na própria planilha, o que facilita o questionamento e entendimento dos resultados.

Conclusões

A utilização de planilhas eletrônicas, não somente esclarece os cálculos de planejamentos experimentais para o ensino, como também podem ser utilizadas com bastante confiabilidade em tratamento de dados obtidos em pesquisas.

Os interessados poderão obter os arquivos no site: <http://lqta.iqm.unicamp.br>

Agradecimentos

Ao CNPq, pela bolsa concedida.

Neto, B. B.; Scarminio, I.S.; Bruns, R.E. Como fazer experimentos. Campinas, Ed. Unicamp, 2002, 2^a ed.