

---

**Ano Letivo** 2022-23

---

**Unidade Curricular** ANÁLISE DE DADOS (DA)

---

**Cursos** QUALIDADE EM ANÁLISES - Erasmus Mundus (2.º Ciclo) (\*)

(\*) Curso onde a unidade curricular é opcional

---

**Unidade Orgânica** Faculdade de Ciências e Tecnologia

---

**Código da Unidade Curricular** 14731009

---

**Área Científica** ESTATÍSTICA

---

**Sigla**

---

**Código CNAEF (3 dígitos)** 462

---

**Contributo para os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável - ODS (Indicar até 3 objetivos)** 9,12,14

---

**Línguas de Aprendizagem** Inglês

**Modalidade de ensino**

Esta UC é composta por 6 módulos de 2 ECTS cada, perfazendo um total de 12 ECTS. Cada módulo é constituído por aulas T e TP (exercícios e resolução de problemas), exercícios de computador e tutoriais.

**Docente Responsável**

Maria Clara Semedo da Silva Costa

DOCENTE	TIPO DE AULA	TURMAS	TOTAL HORAS DE CONTACTO (*)
---------	--------------	--------	-----------------------------

\* Para turmas lecionadas conjuntamente, apenas é contabilizada a carga horária de uma delas.

ANO	PERÍODO DE FUNCIONAMENTO*	HORAS DE CONTACTO	HORAS TOTAIS DE TRABALHO	ECTS
1º	A		N/D	12

\* A-Anual;S-Semestral;Q-Quadrimestral;T-Trimestral

**Precedências**

Sem precedências

**Conhecimentos Prévios recomendados**

Noções básicas de estatística.

**Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências)**

O programa EMQAL tem oito grandes objetivos de aprendizagem.

Os módulos DA contribuem para os seguintes objetivos de aprendizagem:

# 3: Os alunos serão capazes de entender, selecionar e aplicar um conjunto de técnicas analíticas instrumentais apropriadas para um determinado problema. Isto aplica-se aos módulos DA03 Medição de Incertezas e DA04 Design Experimental e Otimização.

# 6: Os alunos serão capazes de analisar e avaliar criticamente um conjunto de dados usando ferramentas e software estatísticos. Isto aplica-se aos seis módulos de DA.

### Conteúdos programáticos

Como a UC é composta por seis módulos individuais, o plano de estudos consiste em seis unidades independentes.

Em DA0101, são apresentados os princípios básicos da estatística descritiva e inferencial. Intervalos de confiança, análise de regressão e propagação de erros são partes importantes. Em DA02 cobre testes de hipóteses e análise de variância (ANOVA). O módulo DA03 trata da avaliação e rastreabilidade da quantificação de incertezas de medição. O DA04 ensina o aluno a planificar experiências eficientes de acordo com os princípios estatísticos, para que o conteúdo das informações nos dados resultantes seja maximizado. O DA05 introduz o reconhecimento de padrões e métodos para classificação e discriminação. O DA06 introduz a análise de dados multivariados, enfatizando a análise de regressão, designadamente componentes principais para análise exploratória e mínimos quadrados parciais.

---

### Metodologias de ensino (avaliação incluída)

Os métodos de ensino desta UC são as aulas regulares, usando apresentações de quadro-negro e power point. Estes são disponibilizados aos alunos. Alguns dos módulos são adequados à realização de exercícios realizados com cálculos manuais. Outros módulos utilizam software comum (por exemplo, Excel) e respetivos exercícios de aprendizagem. O software Sirius é usado em vários módulos, em estudos de caso e em tutoriais e exercícios de computador. São também utilizados seminários e apresentações orais dos alunos.

São aplicados vários métodos de avaliação. Em alguns casos, são realizados exames, enquanto outros módulos exigem o envio de relatórios escritos com base em, por exemplo, em revisões de literatura.

---

### Bibliografia principal

Miller, Miller & Miller: Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry, Pearson.

International vocabulary of metrology  $\zeta$  Basic and general concepts and associated terms  
[[http://www.bipm.org/utis/common/documents/jcgm/JCGM\\_200\\_2012.pdf](http://www.bipm.org/utis/common/documents/jcgm/JCGM_200_2012.pdf)].

Evaluation of measurement data  $\zeta$  Guide to the expression of uncertainty in measurement  
[[http://www.bipm.org/utis/common/documents/jcgm/JCGM\\_100\\_2008\\_E.pdf](http://www.bipm.org/utis/common/documents/jcgm/JCGM_100_2008_E.pdf)]

Quantifying Uncertainty in Analytical Measurement  
[[http://www.eurachem.org/images/stories/Guides/pdf/QUAM2012\\_P1.pdf](http://www.eurachem.org/images/stories/Guides/pdf/QUAM2012_P1.pdf)]

Traceability in Chemical Measurement  
[[http://www.eurachem.org/images/stories/Guides/pdf/EC\\_Trace\\_2003.pdf](http://www.eurachem.org/images/stories/Guides/pdf/EC_Trace_2003.pdf)]

Measurement uncertainty revisited: Alternative approaches to uncertainty evaluation [http://www.eurolab.org/documents/1-2007.pdf]

Brereton: Chemometrics  $\zeta$  Data analysis for the Laboratory and Chemical Plant, Wiley.

Massart, Vandeginste, Buydens, de Jong, Lewi & Smeyers-Verbeke: Handbook of Chemometrics and Qualimetrics, Elsevier.

---

**Academic Year** 2022-23

---

**Course unit**

---

**Courses** QUALITY IN ANALYTICAL LABORATORIES - ERASMUS MUNDUS (\*)

(\*) Optional course unit for this course

---

**Faculty / School** FACULTY OF SCIENCES AND TECHNOLOGY

---

**Main Scientific Area**

---

**Acronym**

---

**CNAEF code (3 digits)** 462

---

**Contribution to Sustainable Development Goals - SGD (Designate up to 3 objectives)** 9,12,14

---

**Language of instruction** English

**Teaching/Learning modality**

The curricular unit is composed of 6 modules of 2 ECTS each, thus having a total of 12 ECTS.  
Contact classes are T and TP (exercises and problem solving), computer exercises and tutorials.

**Coordinating teacher**

Maria Clara Semedo da Silva Costa

Teaching staff	Type	Classes	Hours (*)
----------------	------	---------	-----------

\* For classes taught jointly, it is only accounted the workload of one.

**Contact hours**

T	TP	PL	TC	S	E	OT	O	Total
0	0	0	0	0	0	0	0	N/D

T - Theoretical; TP - Theoretical and practical ; PL - Practical and laboratorial; TC - Field Work; S - Seminar; E - Training; OT - Tutorial; O - Other

**Pre-requisites**

no pre-requisites

**Prior knowledge and skills**

Basic knowledge of statistics.

**The students intended learning outcomes (knowledge, skills and competences)**

The EMQAL programme has eight major learning outcomes. The DA modules contribute to the following learning outcomes:

#3: Students will be able to understand, select and apply a set of instrumental analytical techniques appropriate for a given problem. This applies to modules DA03 Uncertainty Measurement and DA04 Experimental Design and Optimization.

#6: Students will be able to critically analyse and evaluate data using statistical tools and software. This applies to all six modules.

## Syllabus

As the CU is comprised of six individual modules, the syllabus consists of six self-contained units.

In DA0101 basic principles of descriptive and inferential statistics are presented. Confidence intervals, regression analysis and error propagation are important parts. DA02 covers hypothesis testing and analysis of variance (ANOVA). DA03 deals with measurement uncertainty evaluation and traceability. DA04 teaches the student to set up efficient experiment plans according to statistical principles, so that the information content in the resulting data is maximized. DA05 introduces pattern recognition and methods for classification and discrimination. DA06 introduces multivariate data analysis, emphasizing principal component analysis for exploratory analysis and partial least squares for regression.

---

## Teaching methodologies (including evaluation)

The work horse of this CU is regular classes using blackboard and power point presentations. These are made available for the students. Some of the modules are well suited for exercises carried out by hand calculations. Other modules utilize common software (e.g., Excel) and contains exercises using this. The software Sirius is used in several modules. This is used both in case studies, and in computer tutorials and exercises. Seminars and oral presentations by the students are also used.

A variety of assessment methods are in use. In some cases, regular school exams (duration 2 hours) are carried out. Other modules require submission of written reports based on e.g., literature reviews. Home exams, in which the students are given a data set and problem formulation are also utilized. Here, the students get one full working day to analyse the data and write a written report. In one case, the students are given access to a simulator in order to optimize a system.

---

## Main Bibliography

Miller, Miller & Miller: Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry, Pearson.

International vocabulary of metrology  $\zeta$  Basic and general concepts and associated terms  
[[http://www.bipm.org/utis/common/documents/jcgm/JCGM\\_200\\_2012.pdf](http://www.bipm.org/utis/common/documents/jcgm/JCGM_200_2012.pdf)].

Evaluation of measurement data  $\zeta$  Guide to the expression of uncertainty in measurement  
[[http://www.bipm.org/utis/common/documents/jcgm/JCGM\\_100\\_2008\\_E.pdf](http://www.bipm.org/utis/common/documents/jcgm/JCGM_100_2008_E.pdf)]

Quantifying Uncertainty in Analytical Measurement  
[[http://www.eurachem.org/images/stories/Guides/pdf/QUAM2012\\_P1.pdf](http://www.eurachem.org/images/stories/Guides/pdf/QUAM2012_P1.pdf)]

Traceability in Chemical Measurement  
[[http://www.eurachem.org/images/stories/Guides/pdf/EC\\_Trace\\_2003.pdf](http://www.eurachem.org/images/stories/Guides/pdf/EC_Trace_2003.pdf)]

Measurement uncertainty revisited: Alternative approaches to uncertainty evaluation [<http://www.eurolab.org/documents/1-2007.pdf>]

Breton: Chemometrics  $\zeta$  Data analysis for the Laboratory and Chemical Plant, Wiley.

Massart, Vandeginste, Buydens, de Jong, Lewi & Smeyers-Verbeke: Handbook of Chemometrics and Qualimetrics, Elsevier.