

SÚMULA DA DISCIPLINA

1. Identificação

Código e nome da disciplina: QUP 152 - Quimiometria

Professores responsáveis: Marco Flôres Ferrão e Adriano de Araújo Gomes

Nível: Mestrado e Doutorado

Carga horária: 30 h

Créditos: 2 (duas)

Revisado e atualizado em: Agosto_2021

2. Ementa

Análise Exploratória: PCA e HCA. Fundamentos e aplicações em química ambiental, química de alimentos, química farmacêutica e na área de combustíveis e biocombustíveis. Técnicas de reconhecimento de padrões. Fundamentos e aplicações em análise de alimentos, petroquímica e análise de medicamentos. Regressão multivariada. Fundamentos e aplicações em técnicas instrumentais, química ambiental, química de alimentos, química farmacêutica e na área de combustíveis e biocombustíveis.

3. Objetivo

Entender e aplicar as técnicas básicas de tratamento de dados multivariados buscando uma solução mais adequada na avaliação de dados químicos nas áreas ambiental, farmacêutica, tecnologia e ciência de alimentos e combustíveis.

4. Conteúdo Programático

4.1 Fundamentos de Análise por Componentes Principais (PCA);

4.2 Análise de Agrupamentos Hierárquicos (HCA);

4.3 Construção de modelos de classificação: SIMCA (Soft Independent Modeling of Class Analogy) e o Método do K – éximo Vizinho Mais Próximo (KNN);

4.4 Regressão por componentes principais (PCR);

4.5 Regressão por mínimos quadrados parciais (PLS);

4.6 Introdução aos métodos de seleção de amostras e variáveis

5. Avaliação

A avaliação ocorrerá através da análise de artigos científicos, seminários e uma prova escrita (via Moodle).

6. Método de Trabalho/Ensino

As aulas serão teórico-expositivas e ministradas envolvendo diferentes recursos didáticos incluindo leitura de textos, projeções, atividades on-line.

7. Bibliografia

7.1 Ferreira, Márcia M. C. Quimiometria: Conceitos, Métodos e Aplicações. Campinas: Editora da Unicamp, 2015, 493p.



Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Instituto de Química
Programa de Pós-Graduação em Química (Conceito 7/CAPES)
Av. Bento Gonçalves, 9500 – Bairro Agronomia
Porto Alegre – RS – 91501970
☎ (51) 3308 6258 – Fax (51) 3308 7198
<http://www.iq.ufrgs/ppgq> - e-mail: ppgq_iq@ufrgs.br

7.2 Brereton, Richard G. Chemometrics: applications of mathematics and statistics to laboratory systems. New York: Ellis Horwood, 1993. 307 p .

7.3 Massart, D. L. et al. Chemometrics: a textbook. Amsterdam: Elsevier, 1988. 488p.

7.4 Steven D. Brown (Editor), Romã Tauler (Editor), Beata Walczak (Editor). Comprehensive Chemometrics, Elsevier Science, 2009. 4 volumes.

7.5 Brown S. D., Tauler R. Walczak B.. Comprehensive Chemometrics, Elsevier Science, 2009.