

DISCIPLINA: Tópicos especiais em química tecnológica - Quimiometria	Código: 2QUI.106
---	------------------

**VALIDADE:** Início: **02/2019**

Término:

**Carga Horária:** 30 horas/aula

Semanal: 02 aulas

Créditos: 02

**Modalidade:** Teórica

**Classificação do Conteúdo pelas DCN:** Profissionalizante

**Ementa:**

Quimiometria: definições e aplicações; Revisão de conceitos de estatística; Revisão de álgebra linear: vetores e matrizes, projeções em sub-espacos vetoriais, Decomposição em Valores Singulares; Métodos de análise exploratória e reconhecimento de padrões: Análise de Componentes Principais (PCA) e Análise Hierárquica de Agrupamentos (HCA); Métodos de calibração multivariada por Mínimos Quadrados Parciais (PLS); Análise discriminante por mínimos quadrados parciais (PLS-DA).

Cursos	Período	Eixo	Obrigatória	Optativa
Bacharelado em Química Tecnológica	6º	Eixo 07:		X

**Departamento/Coordenação:** Química

**INTERDISCIPLINARIDADES**

<b>Pré-requisitos</b>
Estatística
<b>Co-requisitos</b>
Não se aplica
<b>Disciplinas para as quais é pré-requisito</b>
Não se aplica
<b>Disciplinas para as quais é co-requisito</b>
Não se aplica

<b>Objetivos:</b> A disciplina deverá possibilitar ao estudante	
1.	Compreender o um pouco da história da quimometria no Brasil.
2.	Rever conceitos de estatística e álgebra linear para melhor compreensão dos métodos quimiométricos .
3.	Aprender a organizar os dados químicos para construção das matrizes.
4.	Compreender os métodos de análise exploratória e reconhecimento de padrões: Análise de Componentes Principais (PCA) e Análise Hierárquica de Agrupamentos (HCA).
5.	Compreender o método de calibração multivariada por Mínimos Quadrados Parciais (PLS).
6.	Compreender o método de análise discriminante por mínimos quadrados parciais (PLS-DA).

Unidades de ensino	Carga-horária Horas/aula
I. Introdução	02
II. Revisão de estatística e álgebra linear	08
III. Organização dos dados e pré-tratamento	02
IV. Métodos de análise exploratória e reconhecimento de padrões	06
V. Métodos de calibração multivariada por Mínimos Quadrados Parciais	06
VI. Análise discriminante por mínimos quadrados parciais	06
<b>Total</b>	<b>30</b>

Bibliografia Básica	
1.	Ferreira, M. M. C. <i>Quimiometria: Conceitos, Métodos e Aplicações</i> . Campinas, SP: Editora Unicamp, 2015.
2.	Mingoti, S. A. <i>Análise de dados através de métodos de estatística multivariada: Uma abordagem aplicada</i> . Belo Horizonte, MG: Editora UFMG, 2007.
3.	Freire, C. A. de L.; Charnet, E. M. R.; Bonvino, H.; Charnet, R. <i>Análise de modelos de regressão linear com aplicações</i> . Campinas, SP: Editora Unicamp, 1999.

Bibliografia Complementar	
1.	Harris, D. C. <i>Análise Química quantitativa</i> . 6. ed. Rio de Janeiro: Editora LTC, 2005.
2.	Rodrigues, M. I.; Iemma, A. F. Planejamento de experimentos e otimização de processos: uma estratégia sequencial de planejamentos. Campinas, SP: Editora Casa do Pão, 2005.
3.	Neto, B.B., Scarmínio, I.S., Bruns, R.E. <i>Como fazer experimentos</i> , Editora Unicamp, 4 <sup>a</sup> ed., 2010.
4.	Correia, P.R.M., Ferreira, M.M.C. <i>Reconhecimento de padrões por métodos não supervisionados: explorando procedimentos quimiométricos para tratamento de dados analíticos</i> . Química Nova, vol.30, n.2, p.481-487, 2007.
5.	B.B. Neto, I. S. Scarmínio e R. E. Bruns. <i>25 Anos de Quimiometria no Brasil</i> . Quím. Nova 2006, 29 (6) 1401-1406.

Professor (a) responsável: Prof. Júnia de Oliveira Alves Binatti	Data: 04/02/2019
---	---------------------

Coordenador (a) do curso: Prof. Marcio Silva Basílio	Data: 04/02/2019
---	---------------------