

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

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

Objetivos: 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
Total	30

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 ^a 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
---	---------------------